

Mineralogie I

Pro 1. ročník odborné geologie

přednáší Václav Vávra

Základy strukturní
krystalografie

Rozdělení předmětu mineralogie

Všeobecná mineralogie

- morfologická krystalografie - zabývá se vnějším tvarem krystalů
- strukturní krystalografie - studuje zákonitosti krystalových struktur
- fyzikální krystalografie - zabývá se fyzikálními vlastnostmi minerálů
- krystalová chemie - studuje chemické vztahy a zákonitosti v minerálech
- genetická mineralogie - řeší vznik, výskyt a přeměny minerálů

Systematická (speciální) mineralogie - rozděluje jednotlivé minerály do tříd podle chemické a strukturní příbuznosti

Topografická mineralogie - zpracovává výskyt nerostů podle nalezišť

Experimentální mineralogie - studuje fáze syntetizované v laboratorních podmínkách a sleduje jejich chování za různých teplot a tlaků

Technická mineralogie je disciplínou mineralogie aplikovanou na technické hmoty jako např. betony, strusky, elektrárenské popílky a podobné materiály

Mineralogie a ostatní vědní disciplíny

V mineralogii se využívají poznatky z řady jiných vědních oborů.

Mezi nejdůležitější patří:

- ✓ matematika (především v krystalografii a optice)
- ✓ fyzika (v oblasti RTG difrakce nebo optice)
- ✓ chemie (hlavně v krystalochemii)

Mineralogie jako geologická věda tvoří základ pro většinu ostatních geologických disciplín, především pro **petrologii** a **geochemii**.

Základní pojmy v mineralogii

Minerál je homogenní přírodní fáze s přesně definovatelným chemickým složením (ne vždy stálým) a s vysoce uspořádanou stavbou částic (atomů, ionů, molekul). Většinou vzniká v anorganických procesech.

- Pod pojmem přírodní fáze se obvykle míní substance vzniklá přírodním procesem. Látky připravené v laboratoři se označují jako syntetické. Antropogenní látky, které vznikly působením člověka, a jsou strukturně i chemicky identické s minerály je třeba označovat jako jejich *syntetické ekvivalenty*.
- Homogenitou fáze máme na mysli, že látka má stejné fyzikální a chemické vlastnosti v kterékoliv své části. Definovatelné chemické složení znamená, že můžeme chemismus minerálu vyjádřit určitým vzorcem, např. křemen jako SiO_2 . Některé minerály však mají složení proměnlivé, jako třeba dolomit $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$, u kterého je poměr Ca a Mg kolísavý.
- Uspořádaná stavba atomů v minerálu odpovídá geometricky definovatelné struktuře. Minerály jsou látky krystalické.

Skupenství látek

- Je-li kinetická energie tepelného pohybu částic v látce tak velká, že jejich vzájemnou interakci můžeme zanedbat, mluvíme o *plynném skupenství* látky. Rozmístění částic v prostoru je zcela náhodné (statisticky homogenní). Všechny fyzikální vlastnosti jsou izotropní, tj. shodné ve všech směrech.
- S klesající teplotou klesá kinetická energie částic a začínají se mezi nimi více uplatňovat vazebné síly tak, že látka přechází do *skupenství kapalného*. V prostoru můžeme najít uspořádané oblasti, které odpovídají vazbám v molekulách plynu – jedná se tedy o lokální uspořádání částic na krátkou vzdálenost. Jednotlivé molekuly jsou uspořádány statisticky, takže fyzikální vlastnosti jsou izotropní. Je to stav, který je totožný s pevnými fázemi v amorfním stavu (viz dále).
- Při ochlazení látky pod bod tuhnutí, je kinetická energie částic tak nízká, že jednotlivé stavební částice jsou navzájem spojeny - vzniknou stabilní vazby. Mluvíme potom o *skupenství pevném* (tuhém). Stavební částice jsou v prostoru pravidelně uspořádány (periodicky homogenně), dochází pouze k určitým tepelným vibracím atomů kolem uzlových pozic ve struktuře.

Látky amorfní

Seskupení částic v pevném stavu nemusí být vždy pravidelné. Při náhodném uspořádání, kdy se strukturní stav podobá kapalinám, mluvíme o látkách amorfních (můžeme je označit jako „zamrzlé“ kapaliny). Příkladem mohou být skla, organické pryskyřice nebo velmi rychle ochlazená kovová tavenina. Pro tyto látky je příznačná izotropie fyzikálních i chemických vlastností a nejednoznačná teplota tání (tání probíhá v širokém teplotním intervalu). Tyto látky lze rozdělit do dvou skupin:

- amorfní substance, které nikdy nebyly krystalické a nedifraktují RTG záření ani elektrony.
- **metamiktní substance**, které původně krystalické byly, ale jejich struktura byla zničena rozpadem jader radioaktivních prvků, které obsahují; strukturu těchto substancí je možné rekonstruovat pouhým vyžiháním.
Jmenované amorfní fáze se někdy označují jako *mineraloidy*.

Látky krystalické, krystaly

- *Krystalické látky* jsou takové, jejichž stavební částice (atomy, iony, molekuly) jsou spojovány do stavebních jednotek a tyto jsou v prostoru rozmístěny pravidelně periodicky. Většina látek má tendenci při dostatečně nízké teplotě krystalizovat a tím se dostat do stavu, kdy je uspořádání stavebních částic ve struktuře z energetického hlediska nejvýhodnější.
- *Krystal* je těleso pevné látky, pro které platí:
 - ✓ krystal je homogenní anizotropní prostředí a je fyzikálně dobře definován. Homogenitou se míní, že každá fyzikální vlastnost měřená v daném směru bude v libovolném objemu stejná. Anizotropie se projevuje např. ve tvaru krystalů, který je důsledkem odlišné rychlosti růstu krystalu v různých směrech, v tvrdosti nebo v různé absorpci světla.
 - ✓ krystal má pevné chemické složení a ostrý bod tání, který je pro danou látku charakteristický
 - ✓ krystal má schopnost omezit svůj vnější tvar plochami, které se sbíhají v hranách a rozích

Rozhodujícím kritériem, zda je látka krystalická, je vždy její vnitřní stavba.

Pojmy pro definici krystalické látky

Krystalový prostor je prostor, který krystal zaujímá.

Krystal označíme jako *uspořádaný*, pokud můžeme v krystalovém prostoru předpokládat trojrozměrnou periodicitu stavebních jednotek.

Krystal považujeme za *neuspořádaný*, pokud jsou v krystalu významné odchylky od periodicity.

Těleso, tvořené jediným krystalem nebo kompaktním agregátem několika krystalů se stejnou orientací, označujeme (v mineralogii) jako *monokrystal*. Agregát více různě orientovaných krystalů se označuje jako polykrystal nebo *polykrystalická* látka.

Ideální krystal lze definovat jako homogenní anizotropní prostředí s ostrým bodem tání a trojrozměrně periodickým uspořádáním stavebních částic.

Reálný krystal

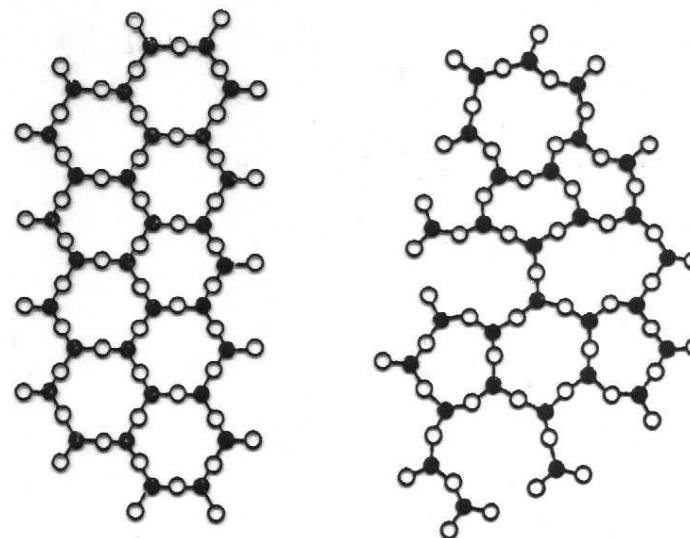
Ideální krystal je pouhým modelem, který se používá pro různé teoretické výpočty a hypotézy, v přírodě se ale něco podobného prakticky nevyskytuje. Krystaly (krystalické látky) kolem nás jsou *reálné krystaly*, ve kterých běžně dochází k porušování trojrozměrné periodicity, zejména těmito způsoby:

- ohraničení povrchu je poruchou periodicity
- na některých strukturních pozicích může docházet k vzájemné substituci dvou a více různých atomů
- během růstu krystalu, může docházet ke vzniku poruch v krystalové struktuře
- ve vrstevných strukturách může být periodicitu narušena odlišným nebo zcela nepravidelným kladem vrstev

Definice reálného krystalu – pojmy I

- *krystalovou strukturou* rozumíme způsob, jakým jsou stavební částice uspořádány v krystalovém prostoru.
- *lokální uspořádání částic* je takové, které je ve struktuře realizováno díky silám působícím na „krátkou vzdálenost“.
- *celkové uspořádání částic* je takové, které je realizováno pomocí sil působících na „dlouhou vzdálenost“.

Příkladem může být struktura krystalických modifikací SiO_2 a amorfního SiO_2 . Lokálním uspořádáním částic se zde míní existence tetraedrů SiO_4 u obou typů struktur. Celkové uspořádání částic se projeví existencí pravidelného uspořádání tetraedrů u krystalických modifikací SiO_2 (vlevo) resp. absencí takového uspořádání ve „struktuře“ amorfního SiO_2 (vpravo).



Definice reálného krystalu – pojmy II

Stavební jednotka je disjunktní (nesouvislou) částí struktury. Soustava stavebních jednotek tvoří úplnou strukturu a neexistuje žádná část struktury, která by nebyla součástí existující stavební jednotky. Pro výběr stavebních jednotek platí určitá, přesně definovaná pravidla.

Konfigurace stavebních jednotek - u výše uvedeného příkladu krystalických modifikací SiO_2 lze stavební jednotku (tetraedr SiO_4) převést do druhého pomocí dvou transformací - existují dvě možné konfigurace párů stavebních jednotek. U amorfního skla je nekonečný počet konfigurací párů - struktura nemá uspořádání na „dlouhou vzdálenost“.

Definice reálného krystalu

Látku považujeme za krystalickou, když jsou pro stavební jednotky, které jsou pro ni charakteristické splněny tyto podmínky:

- I. Všechny stavební jednotky jsou geometricky ekvivalentní, nebo počet druhů stavebních jednotek je malý v porovnání s celkovým počtem stavebních jednotek obsažených v uvažovaném krystalu.**
- II. Počet druhů párů sousedících stavebních jednotek je také malý v porovnání s celkovým počtem těchto párů v krystalu.**

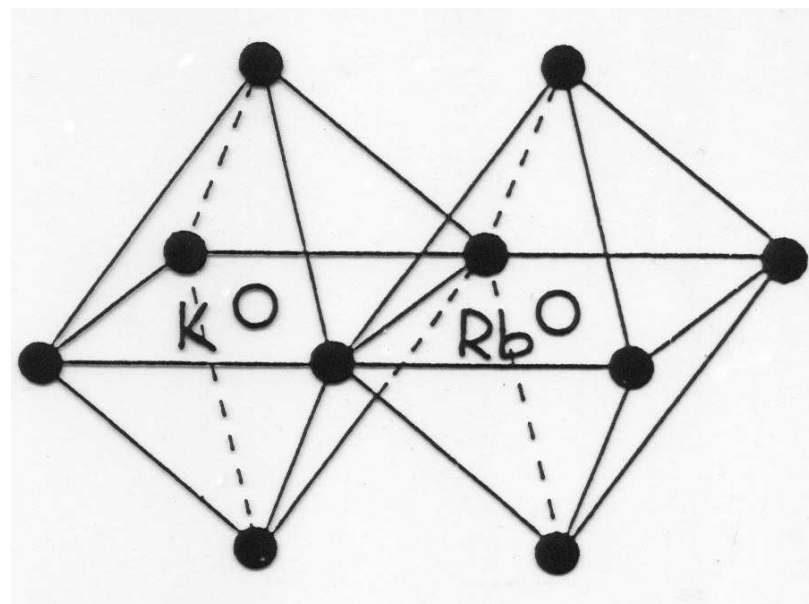
Dornberger – Schiffová a Grellová (1982)

Definice krystalické látky - příklad

Příkladem může být směsný krystal (K,Rb)Cl, kde jsou dva druhy stavebních jednotek – K-oktaedry a Rb-oktaedry. Páry stavebních jednotek jsou možné pouze tři:

- 1) K-oktaedr - Rb-oktaedr
- 2) K-oktaedr - K-oktaedr
- 3) Rb-oktaedr - Rb-oktaedr

Dva druhy stavebních jednotek a tři druhy jejich párů jsou z hlediska celkového počtu stavebních jednotek a jejich párů v daném objemu zanedbatelné. Uvedená struktura tak vyhovuje uvedené definici.



Symetrie - transformace

Při popisu krystalových struktur se neobejdeme bez určitých pravidel a zákonitostí, které jsou shrnuty do pojmu *symetrie* nebo symetrie krystalové struktury. Jedná se o obecné zákonitosti, které zjednodušují popis i velmi komplikovaných struktur.

Krystalografické transformace můžeme chápat jako změnu polohy bodu o souřadnicích x, y, z , kdy pomocí operací symetrie přejde bod do nové polohy o souřadnicích x', y', z' v rámci jedné ortogonální souřadné soustavy. Stejný výsledek dostaneme transformací souřadné soustavy os x, y, z na osy x', y', z' .

Z lineárních transformací se v krystalografii uplatňují pouze transformace izometrické, tj. takové, kde nedochází ke změně vzdálenosti mezi dvěma body před a po transformaci. Postačující podmínkou je, aby transformační matice byla ortogonální.

Operace symetrie

Operace symetrie je geometrická transformace, která zachovává vzájemné vzdálenosti v tělese a po jejím provedení nerozlišíme, zda byla s tělesem nějaká transformace provedena.

Rozlišujeme tyto základní operace symetrie:

- Inverze (I)
- Zrcadlení (M) - $M(o_1, o_2)$, kde o_1 a o_2 jsou osy definující rovinu zrcadlení, např. $M(x, y)$
- Rotace (R) - $R(\alpha, o)$, kde α je úhel otáčení a o je osa kolem níž se otáčí, např. $R(\pi, z)$. Možné značení je $R_n(o)$, kde $n = 2\pi/\alpha$.
- Translace (T)

Uzavřené operace symetrie - inverze

Uzavřené operace symetrie jsou takové, jejichž opakovaným prováděním se objekt dostane opět do výchozí polohy.

Bod o souřadnicích (x, y, z) se inverzí transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí:

$$x' = -x$$

$$y' = -y$$

$$z' = -z$$

Uzavřené operace symetrie - zrcadlení

Bod o souřadnicích (x, y, z) se zrcadlením transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí (rovina zrcadlení x,y):

$$x' = x$$

$$y' = y$$

$$z' = -z$$

Uzavřené operace symetrie - rotace a rotační inverze

Rotace (R) je operací symetrie se značením $R(\alpha, o)$, kde α je úhel otáčení a o je osa kolem níž se otáčí, např. $R(\pi, z)$.

Rotační inverze je složená operace symetrie, která vznikne kombinací rotace s inverzí. Kombinuje se rotace o úhel α (podle osy o) s inverzí:

$$R_i(\alpha, z) = R(\alpha, z) * I$$

U kombinovaných operací symetrie je třeba dodržet pravidlo o střídání zúčastněných operací. Nezáleží na pořadí, zda provedeme rotace – inverze nebo inverze – rotace, ale nelze provést např. rotace – rotace – inverze – inverze.

Uzavřené operace symetrie - rotační zrcadlení

Tato operace symetrie je kombinací rotace se zrcadlením v rovině kolmé na osu o . Provádíme-li rotaci o úhel α podle osy z , zrcadlíme podle roviny (x,y) :

$$R_m(\alpha, z) = R(\alpha, z) * M(x, y)$$

Otevřené operace symetrie - translace

Otevřené operace symetrie v konečném důsledku netransformují původní objekt do výchozí polohy.

Aplikujeme-li na bod o souřadnicích (x,y,z) translaci, vyjádřenou vektorem \mathbf{t} , pak pro transformovaný bod (x',y',z') bude platit:

$$x' = x + t_1$$

$$y' = y + t_2$$

$$z' = z + t_3$$

Otevřené operace symetrie - šroubová operace

Operace symetrie, která vzniká složením rotace podél osy o a následné translace ve směru této osy. Translace t je vyjádřena zlomkem celkového stoupání šroubového pohybu. Jde-li např. o rotaci o π , pak je $t = \pi/2\pi = 1/2$ a výslednou operaci lze zapsat jako:

$$S (\pi, z, 1/2)$$

Otevřené operace symetrie - skluzová operace

Jde o operaci symetrie, která vzniká kombinací zrcadlení v definované rovině a translace podél této roviny. Velikost posunutí je vyjádřena zlomkem periody identity (vzdáleností dvou identických bodů v daném směru) v dané rovině, např.:

- $G(x, y, x/2)$ je zrcadlení v rovině x, y a posunutí o $1/2$ ve směru x
- $G(y, x, y/2)$ je zrcadlení v rovině x, y a posunutí o $1/2$ ve směru y

Prvky symetrie

Prvek symetrie je geometrický prvek (bod, přímka, rovina), vůči němuž provádíme s tělesem příslušnou operaci symetrie. Samotný prvek je invariantní vůči operaci symetrie.

Prvek symetrie

Střed symetrie – i

Rovina symetrie – m

Osy rotace – n

Inverzní osa – $(-n)$

Zrcadlové osy – $(\sim n)$

Šroubové osy – n_j ($j= 1,2,\dots,n-1$)

Skluzové roviny – g

Operace symetrie

Inverze – I

Zrcadlení – $M (o_1, o_2)$

Rotace – $R (\alpha, o)$

Rotace s inverzí – $R_i (\alpha, o)$

Rotace se zrcadlením – $R_m (\alpha, o)$

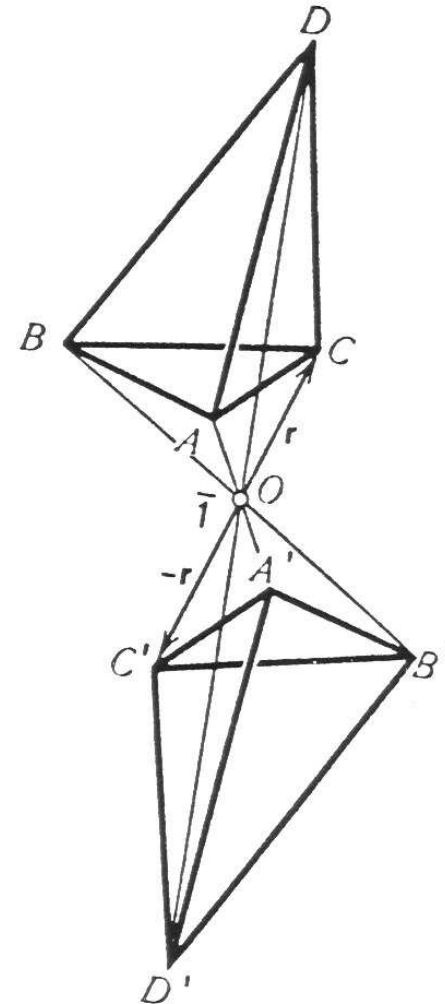
Rotace s translací – $S (\alpha, o, t)$

Zrcadlení s translací – $G (o_1, o_2, t)$

Střed symetrie, střed inverze ($i, -1, C_i$)

Operace symetrie náležející
tomuto prvku symetrie jsou:

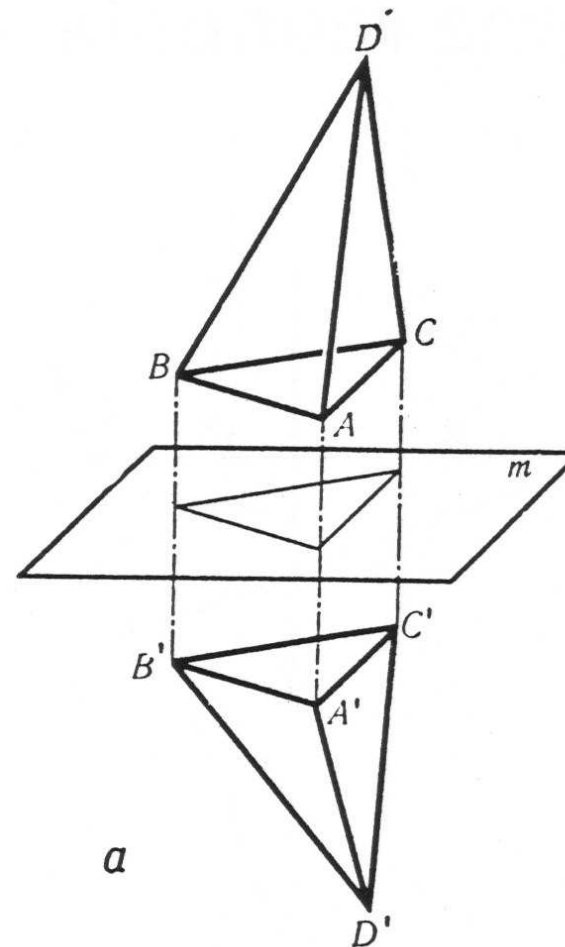
- 1) I
- 2) $I * I = E$ (identita)



Rovina symetrie (m, σ)

Operace symetrie náležející
tomuto prvku symetrie jsou:

- 1) $M(o_1, o_2)$
- 2) $M(o_1, o_2) * M(o_1, o_2) =$
 $M^2(o_1, o_2) = E$ (identita)



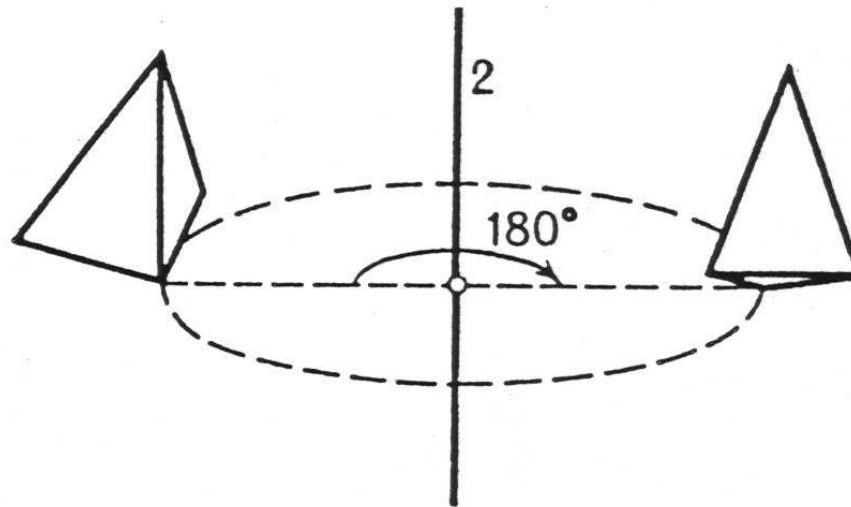
Osy rotace

Osy rotace (osy symetrie) se rozlišují podle velikosti úhlu $\alpha = 2\pi/n$, o který je nutné n -krát otočit tělesem (bodem) kolem osy, abychom přes nerozlišitelné ekvivalentní polohy obdrželi výchozí polohu. Číslem n se označuje četnost osy rotace. Krystalografické osy rotace mají pouze tyto četnosti: $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

Dvojčetná osa ($2, C_2$)

Dvojčetná osa obsahuje tyto operace symetrie (osou otáčení je směr z):

1. $R(\pi, z)$
2. $R(\pi, z) * R(\pi, z) = R^2(\pi, z) = E$

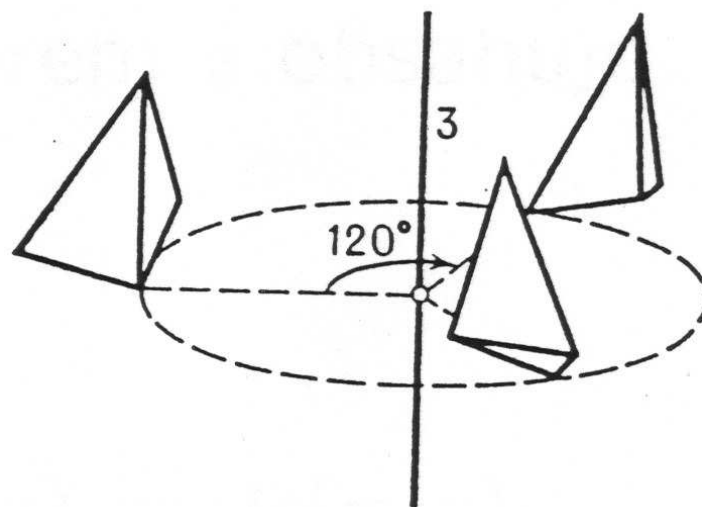


Trojčetná osa ($3, C_3$)

Pro trojčetnou osu je $n = 3$ a $\alpha = 2\pi/3$.

Trojčetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

- 1) $R(2\pi/3, z)$
- 2) $R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) = R^2(2\pi/3, z) = R(4\pi/3, z)$
- 3) $R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) = R^3(2\pi/3, z) = E$

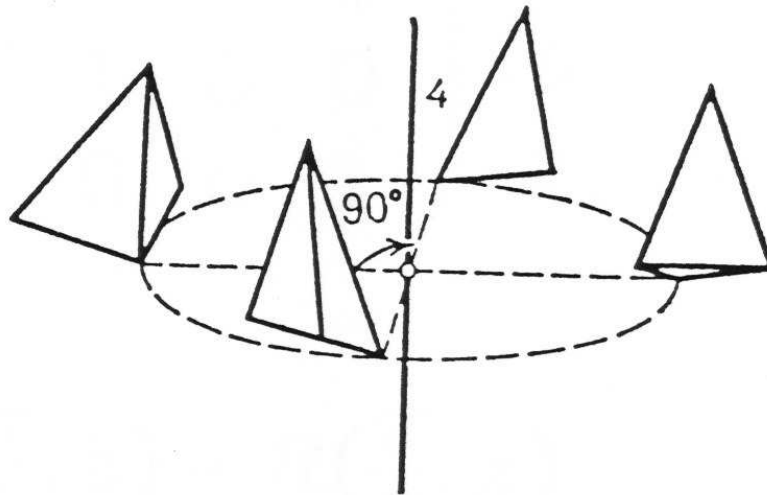


Čtyřčetná osa ($4, C_4$)

Pro čtyřčetnou osu platí: $n = 4, \alpha = 2\pi/4 = \pi/2$.

Čtyřčetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

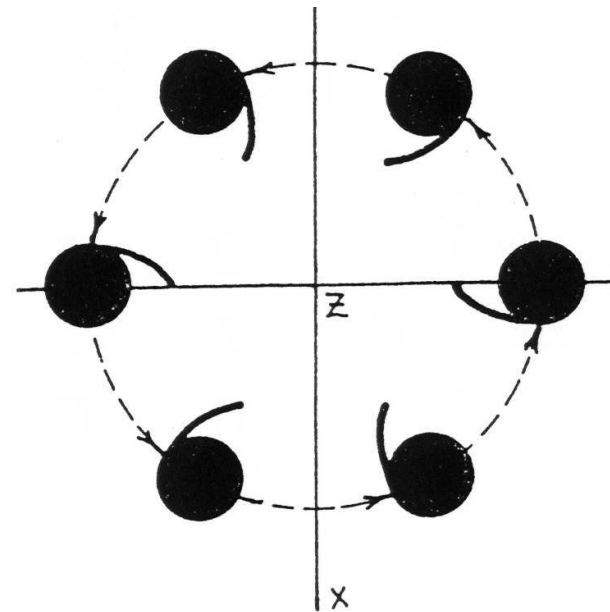
- 1) $R(\pi/2, z)$
- 2) $R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) = R^2(\pi/2, z) = R(\pi, z)$
- 3) $R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) = R^3(\pi/2, z) = R(3\pi/2, z)$
- 4) $R^4(\pi/2, z) = R(2\pi, z) = E$



Šestičetná osa ($6, C_6$)

Pro šestičetnou osu platí: $n = 6$, $\alpha = \pi/3$. Šestičetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

- 1) $R(\pi/3, z)$
- 2) $R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) = R^2(\pi/3, z) = R(2\pi/3, z)$
- 3) $R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) = R^3(\pi/3, z) = R(\pi, z)$
- 4) $R^4(\pi/3, z) = R(4\pi/3, z) = R^2(2\pi/3, z)$
- 5) $R^5(\pi/3, z) = R(5\pi/3, z)$
- 6) $R^6(\pi/3, z) = E$



Inverzní osy

Inverzní osy jsou složené prvky symetrie, jejichž operacemi symetrie je rotace kombinovaná s inverzí. Na pořadí operací nezáleží, musí se však vždy provádět jako celek. Dále se inverzní osy rozlišují podle velikosti úhlu rotace $\alpha = 2\pi/n$.

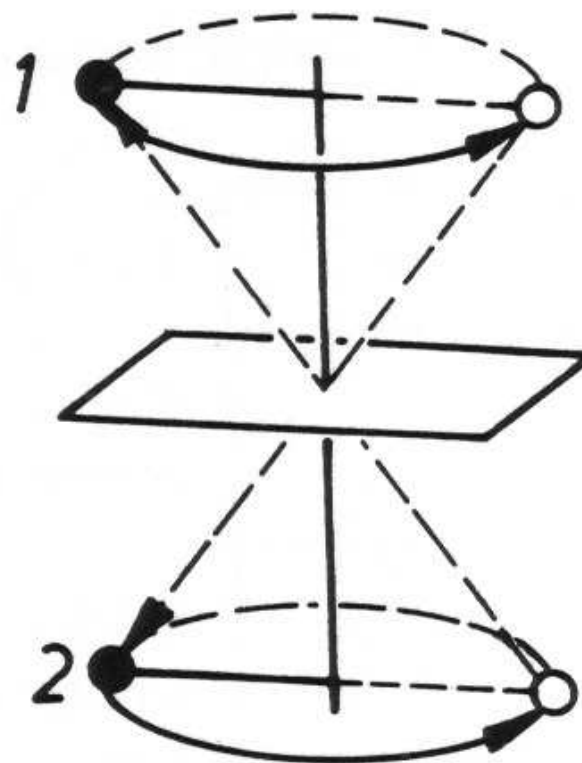
Dvojčetná inverzní osa $(-2, C_{2i})$

Dvojčetná osa totožná se směrem osy z obsahuje tyto operace symetrie (rotace):

1. $R(\pi, z) * I = R_i(\pi, z)$
2. $[R(\pi, z) * I]^2 = R_i^2(\pi, z) = E$

Operace podle dvojčetné inverzní osy jsou stejné jako operace podle roviny symetrie:

$$R_i(\pi, z) = M(x, y)$$



Trojčetná inverzní osa ($-3, C_{3i}$)

Osa totožná se směrem z obsahuje kombinace těchto operací symetrie:

- 1) $R(2\pi/3, z)$
- 2) $R^2(2\pi/3, z)$
- 3) E
- 4) I

Operace jsou stejné jako ty, které vzniknou kombinací dvou samostatných prvků symetrie 3 a i:

$$-3 = 3 * i$$

Trojčetná inverzní osa není tedy samostatným prvkem symetrie.

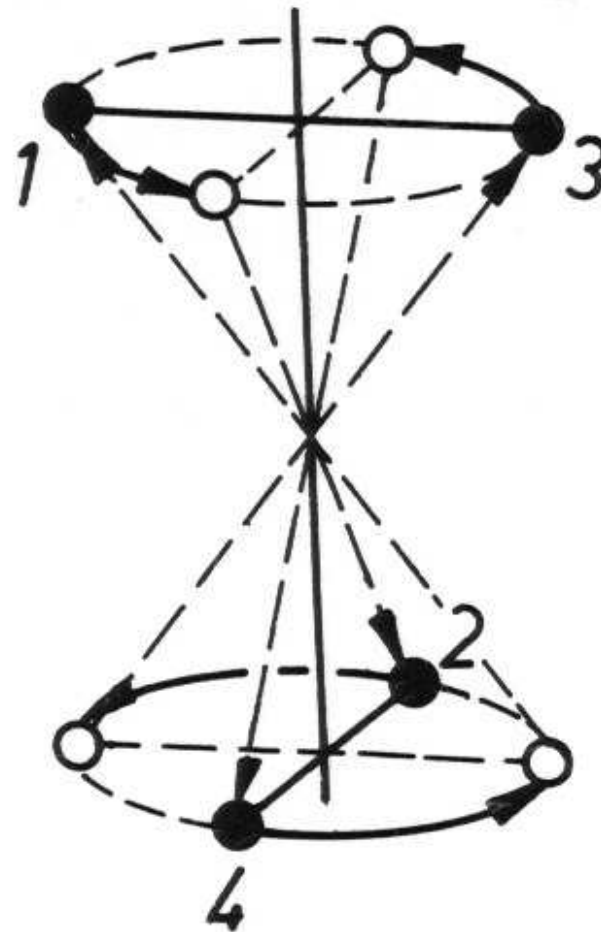


Čtyřčetná inverzní osa ($-4, C_{4i}$)

Osa totožná se směrem
z obsahuje následujících
operace symetrie:

- 1) $R_i(\pi/2, z)$
- 2) $R_i^2(\pi/2, z) = R(\pi, z)$
- 3) $R_i^3(\pi/2, z)$
- 4) E

Obsaženy jsou dvě nové
operace $R_i(\pi/2, z)$ a
 $R_i^3(\pi/2, z)$ a proto je čtyřčetná
inverzní osa samostatným
prvkem symetrie.



Šestičetná inverzní osa ($-6, C_{6i}$)

Osa totožná se směrem
z obsahuje kombinace
následujících prvků symetrie:

1) $R(2\pi/3, z)$

2) $R^2(2\pi/3, z)$

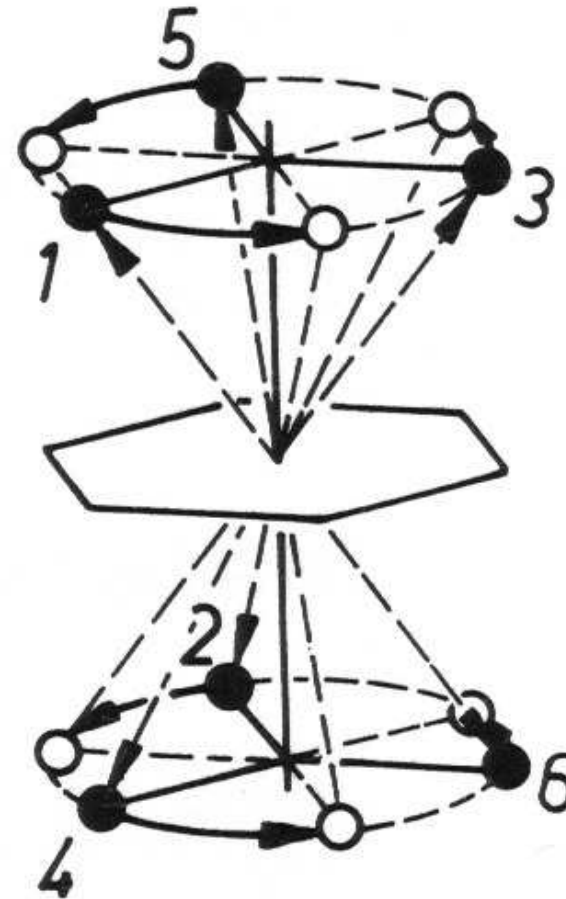
3) E

4) $M(x, y)$

**Operace jsou stejné jako ty,
které vzniknou kombinací
dvou samostatných prvků
symetrie 3 a m (kolmé na osu):**

$$-6 = 3 \perp m$$

Šestičetná inverzní osa není
samostatným prvkem symetrie.



Šroubové osy I

Jde o složené prvek symetrie, jejichž operacemi je rotace v kombinaci s translací ve směru osy rotace. Šroubová osa musí mít určitý speciální směr (rovnoběžná s libovolnou mřížovou translací). Jinými slovy se šroubová osa skládá z rotace o úhel $360^\circ/x$ ($x = 1,2,3,4,6$) a translace podél definovaného vektoru ve směru této osy. Na rozdíl od rotačních a rotoinverzních os, je směr rotace šroubové osy velmi důležitý.

U popisu šroubových os se vychází z pravotočivého systému souřadných os, takže pravotočivá osa ve směru z má translační vektor ve stejném směru vzhůru (tj. ve směru palce pravé ruky, kdy prsty naznačují rotační pohyb od osy x k y).

Šroubové osy II

Jedná-li se o n -četnou rotační osu, pak n otočení doprovázených n translacemi τ podél šroubové osy musí vést k translačnímu pohybu výchozího objektu o celočíselný násobek (m) této mřížové translace t :

$$n \tau = m t \quad \text{nebo} \quad \tau = (m/n) t$$

kde m , n jsou celá čísla. Obecně lze vyjádřit symbol šroubové osy jako n_m .

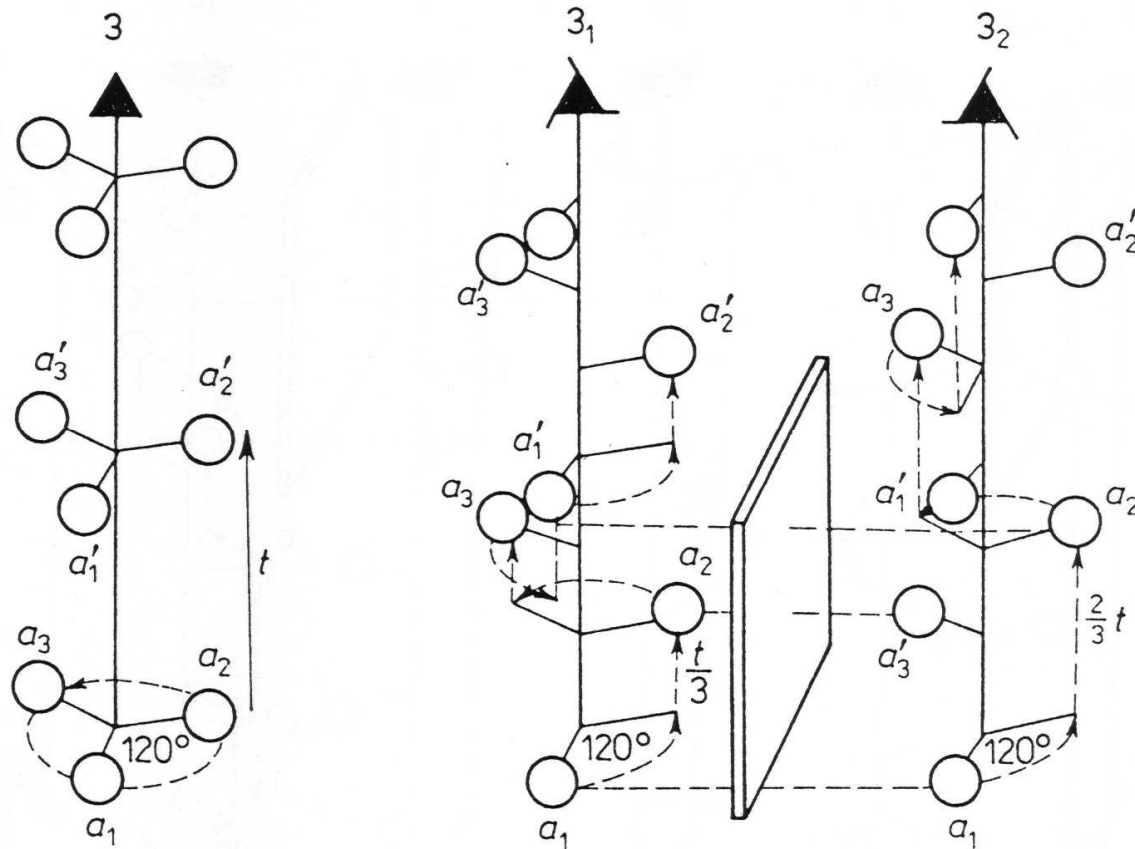
Translační složky šroubové osy tedy závisí na četnosti této osy a mohou nabývat jen určitých hodnot: $2_0, 2_1, 2_2, 3_0, 3_1, 3_2, 3_3, 4_0, 4_1, 4_2, 4_3, 4_4, 6_0, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5, 6_6$ (dolní index značí hodnotu m z výše uvedeného vztahu, je-li $m = 0$ jde o čistou rotaci, v případě, že je $m = n$, jde o čistou translaci).

Šroubové osy III

Šroubové osy $3_1 - 3_2$, $4_1 - 4_3$, $6_1 - 6_5$, $6_2 - 6_4$ jsou navzájem *enantiomorfní* - můžeme rozlišit pravotočivou a levotočivou (mají stejné stoupání, ale opačný smysl šroubového pohybu). Za pravotočivou osu (3_1 , 4_1 , 6_1 , 6_2) se považuje taková, jejíž otáčivý pohyb je ve směru prstů pravé ruky, když palec míří podél osy.

Šroubové osy IV

Příklad operací na trojčetných šroubových osách 3 , 3_1 , 3_2 .



Skluzové roviny I

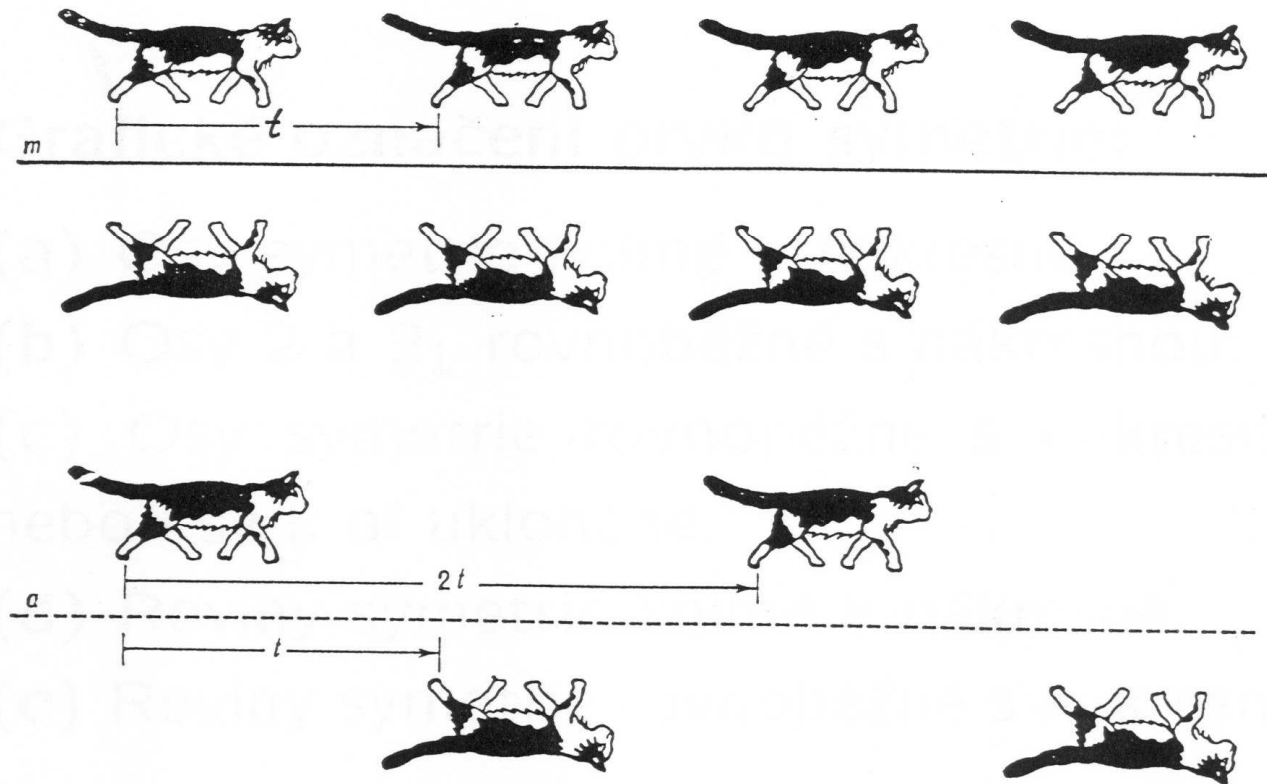
(roviny posunutého zrcadlení)

Jsou to prvky symetrie, jejichž operacemi je zrcadlení kombinované s translací podél roviny zrcadlení. Skluz podél osy a má translační složku $\tau = (1/2)\mathbf{t}$ a označuje se jako a -skluz (obdobně pro směry b , c). U úhlopříčného skluzu má translační složka velikost $\tau = (1/2)\mathbf{a} + (1/2)\mathbf{b}$. Diamantový skluz je o $1/4$ tělesové úhlopříčky základní buňky.

| typ skluzu | symbol | orientace | translační složky τ |
|-------------------|---------------|--|--|
| osový | a | $\perp \mathbf{b}$ nebo $\perp \mathbf{c}$ | $1/2\mathbf{a}$ |
| osový | b | $\perp \mathbf{c}$ nebo $\perp \mathbf{a}$ | $1/2\mathbf{b}$ |
| osový | c | $\perp \mathbf{a}$ nebo $\perp \mathbf{b}$ | $1/2\mathbf{c}$ |
| úhlopříčný | n | $\perp \mathbf{c}$; $\perp \mathbf{a}$; $\perp \mathbf{b}$ | $1/2(\mathbf{a}+\mathbf{b}); 1/2(\mathbf{b}+\mathbf{c}); 1/2(\mathbf{a}+\mathbf{c})$ |
| diamantový | d | $\perp \mathbf{c}$; $\perp \mathbf{a}$; $\perp \mathbf{b}$ | $1/4(\mathbf{a}\pm\mathbf{b}); 1/4(\mathbf{b}\pm\mathbf{c}); 1/4(\mathbf{a}\pm\mathbf{c})$ |

Skluzové roviny II

Rozdíl mezi rovinou zrcadlení a skluzovou rovinou.



Značení prvků a operací symetrie

| Operace souměrnosti | Prvek souměrnosti | Symbol | Grafické označení | |
|-------------------------------------|----------------------|-----------------------------|--|-------------------------------|
| | | | kolmo k rovině projekce | rovnoběžně s rovinou projekce |
| zrcadlení | rovina (zrcadlo) | m | | |
| otáčení (rotace) | osa | 2, 3, 4, 6 | | |
| inverze | střed | $\bar{1}$ | | žádné |
| rotační inverze | rotačně inverzní osa | $\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ | | žádné |
| translace | přímka | žádný | žádné | žádné |
| skluzný pohyb (zrcadlení-translace) | skluzná rovina | a | | |
| | | b | | |
| | | c | | žádné |
| | | n | - · - · - · - · - | |
| | | d | - · - · - · - · - - · - · - · - · - | |
| šroubový pohyb (otáčení-translace) | šroubová osa | 2_1 | | |
| | | $3_1, 3_2$ | | žádné |
| | | $4_1, 4_2, 4_3$ | | žádné |
| | | $6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ | | žádné |

Krystalová mřížka

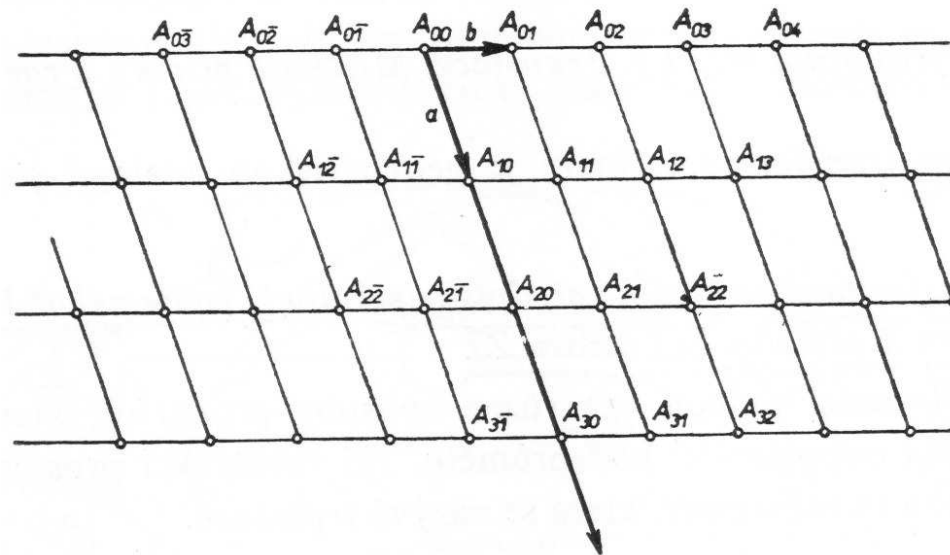
Krystalickou látku v rovnovážném stavu můžeme také chápat jako skupinu uspořádaně rozložených částic (atomy, iony), které kmitají kolem poloh (uzlových bodů), tvořících prostorovou (strukturní, krystalovou) mřížku. Krystalová mřížka představuje schéma translační periodicity rozložení částic (stavebních jednotek) ve struktuře krystalu. *Krystalová mřížka* je tedy abstraktní pojem, který vyjadřuje translační periodicitu rozmístění identických bodů v krystalu. Tyto body mají stejnou hodnotu fyzikálních a geometrických vlastností (tj. stejné a stejně orientované okolí).

Pojem *reálná struktura* krystalu představuje konkrétní prostorové rozložení částic, které je dáno fyzikálními zákonitostmi, takže symetrické rozložení atomů není příčinou, ale důsledkem konfigurace fyzikálních sil v prostoru.

Konstrukce prostorové mřížky I

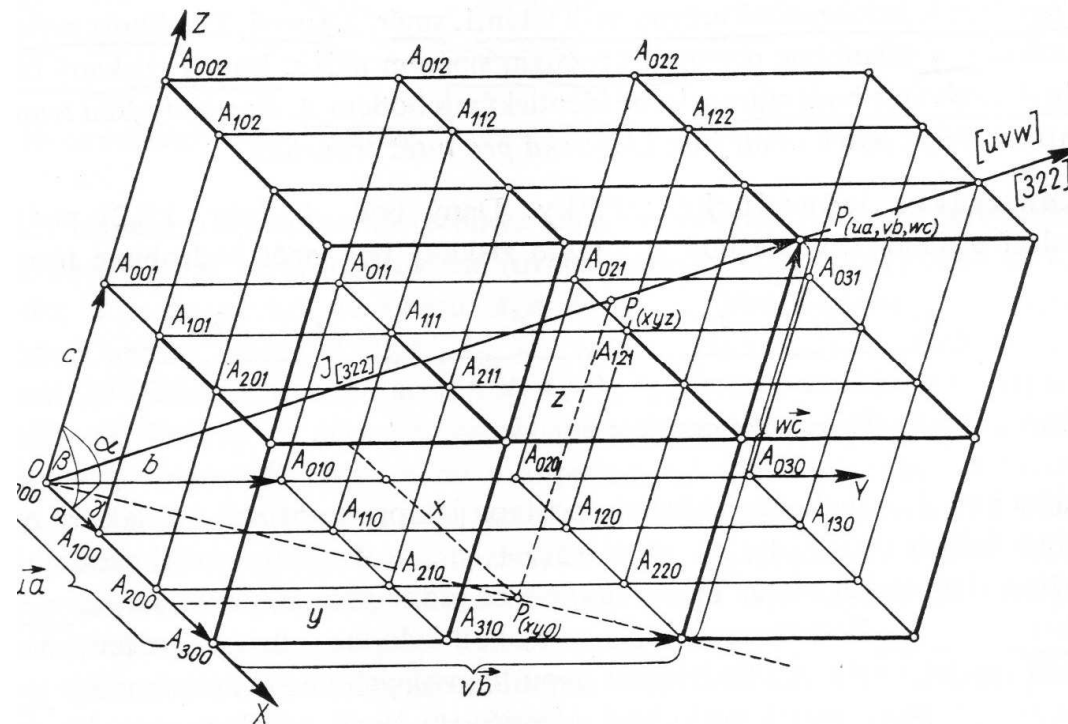
Mějme bod A_0 , který podrobíme translaci \mathbf{a} (posunutí o úsek a) tak, že dostaneme bod A_1 . Opakováním této translace ve směru $+\mathbf{a}$ a také $-\mathbf{a}$, dostaneme množinu translačně identických bodů $A_{-n} \dots A_{+n}$. Body leží na jedné přímce, kterou označujeme jako uzlová (mřížková) přímka. Vzdálenost dvou libovolných identických bodů se označuje jako *perioda identity*.

Podrobíme-li uzlovou přímku translaci \mathbf{b} (která není rovnoběžná s danou přímkou) v kladném i záporném směru, dostaneme *mřížkovou rovinu*. Vektor \mathbf{a} , vektor \mathbf{b} a úhel mezi nimi tvoří *základní buňku* rovinné mřížky.



Konstrukce prostorové mřížky II

Mřížkovou rovinu podrobíme translaci \mathbf{c} (která neleží v dané rovině) v kladném i záporném směru a dostaneme prostorovou mřížku. Uzlové body mřížky A_{ijk} jsou translačně identické s výchozím bodem A_{000} , od něhož konstrukce začala. Prostorová mřížka je na rozdíl od tělesa krystalu nekonečná.



Základní pojmy v prostorové mřížce

Vektor, který spojuje dva libovolné uzly, se označuje jako *mřížkový vektor*:

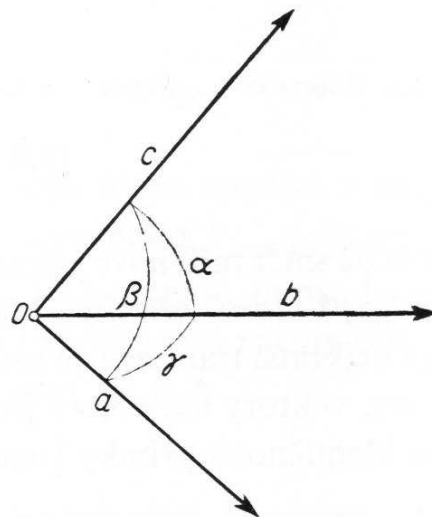
$$\mathbf{t}_i = m\mathbf{t}_1 + n\mathbf{t}_2 + p\mathbf{t}_3,$$

kde m, n, p jsou celá čísla a jeho délka je periodou identity.

Mřížková přímka je každá přímka, která prochází dvěma mřížkovými uzly.

Mřížková rovina prochází třemi mřížkovými uzly, které neleží na jedné přímce.

Buňka mřížky je libovolný rovnoběžnostěn, jehož vrcholy jsou mřížkové uzly. Tato buňka je určena velikostí mřížkových vektorů umístěných do hran rovnoběžnostěnu a třemi úhly, které tyto vektory svírají. Tyto hodnoty $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ se označují jako *parametry buňky*. Jsou uspořádány podle pravotočivé vektorové soustavy, takže úhel α je mezi hranami b a c , úhel β mezi hranami a a c a úhel γ mezi hranami a a b .



Bravaisovy mřížky

Tento typ prostorových mřížek se používá k popisu krystalových struktur.

Bravaisovy mřížky mohou být:

- jednorozměrné (lineární)
- dvojrozměrné (rovinné)
- trojrozměrné (prostorové)

Obecná prostorová mřížka, která nemá omezení ve tvaru základní buňky, může popisovat libovolnou krystalovou strukturu. Zpravidla se ale v mřížkách vyskytují některé speciální znaky (stejně délky hran, úhly 60° , 90° nebo 120°), které zjednodušují krystalovou morfologii a tím i fyzikální vlastnosti.

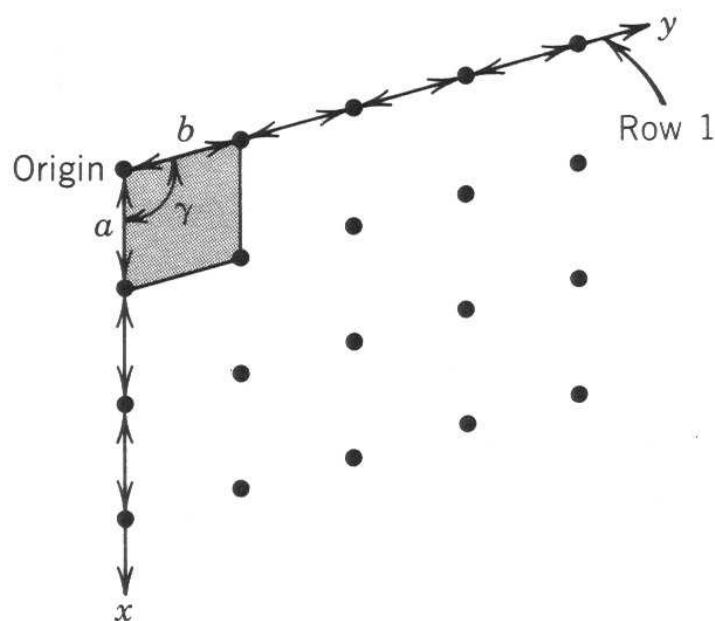
Pokud jsou ve struktuře shodné dvě mřížkové translace ve dvou různých směrech, jsou si v těchto směrech rovné i fyzikální vlastnosti.

Rovinné Bravaisovy mřížky I

Rovinná mřížka je definována dvojicí nekolineárních mřížkových vektorů, které mohou mít obecně libovolnou délku a svírat různé úhly. Tyto dva mřížkové vektory tvoří dvě strany trojúhelníka, takže počet typů rovinných mřížek je shodný s počtem možných druhů trojúhelníků. Protože existuje pět typů trojúhelníků (obecný, rovnoramenný, pravoúhlý nerovnoramenný, pravoúhlý rovnoramenný a rovnostranný), existuje i pět typů rovinných Bravaisových mřížek.

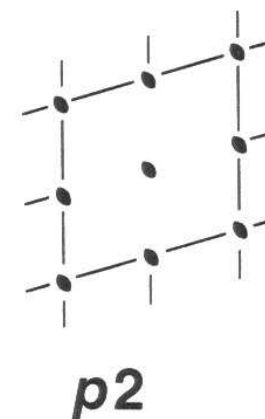
Rovinné Bravaisovy mřížky II

Obecná rovinná mřížka je definována translačními, navzájem různými vektory \mathbf{a} , \mathbf{b} a úhlem γ ($\neq 90^\circ$ nebo 120°), který svírají. V těžišti a uzlových bodech této mřížky jsou dvojčetné osy.



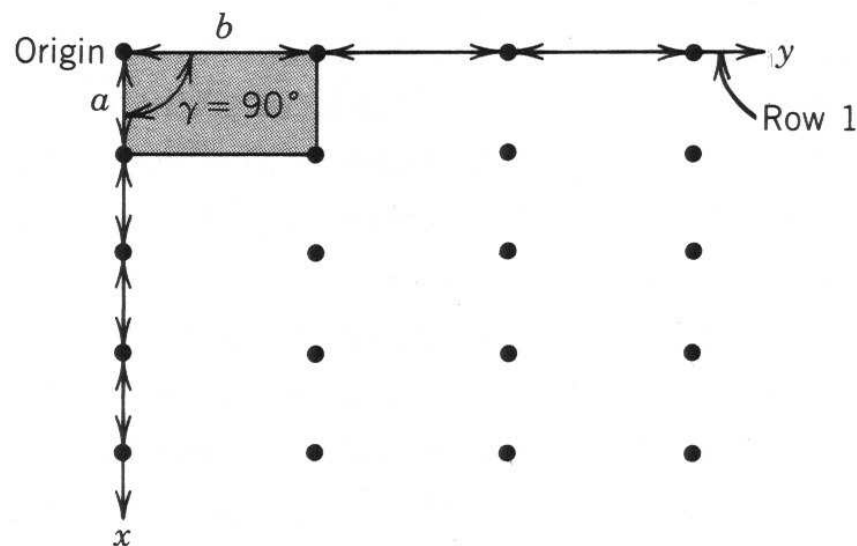
Oblique net

$$a \neq b$$
$$\gamma \neq 90^\circ$$



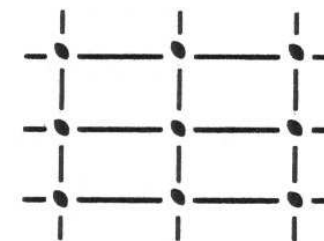
Rovinné Bravaisovy mřížky III

Pravoúhlá rovinná mřížka je definována různými translačními vektory \mathbf{a} , \mathbf{b} a úhlem γ , který je 90° (tyto tři hodnoty definují obecný pravoúhlý trojúhelník). V těžišti se zachovává dvojčetná osa, se kterou jsou paralelní dvě navzájem kolmé roviny zrcadlení.



Rectangular net

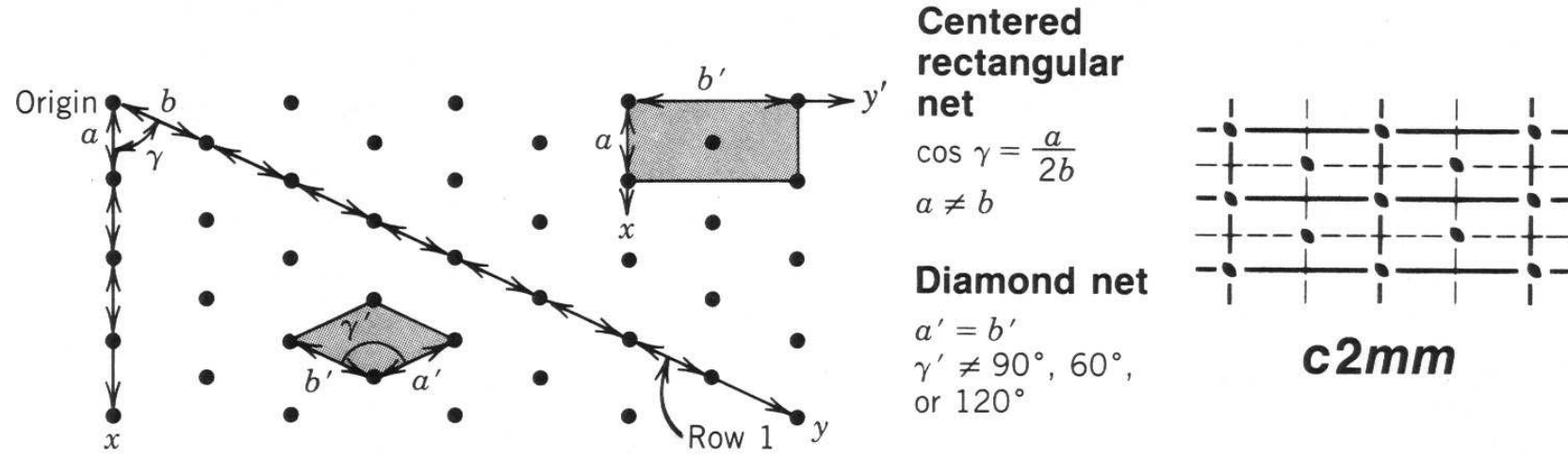
$$a \neq b$$
$$\gamma = 90^\circ$$



p2mm

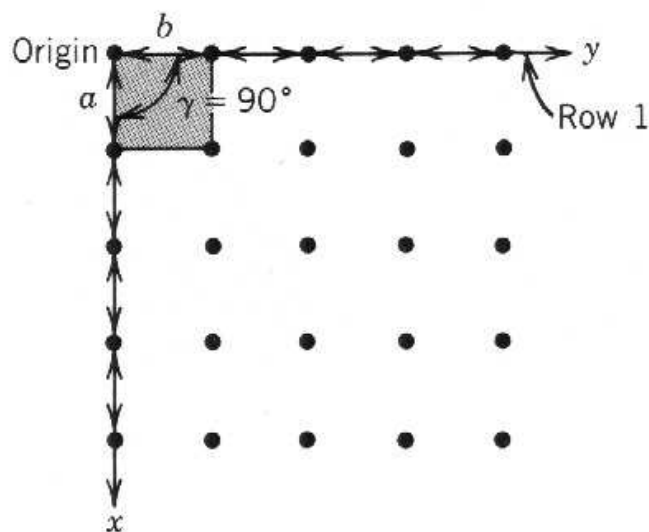
Rovinné Bravaisovy mřížky IV

Romboedrická rovinná mřížka je definována translačními vektory \mathbf{a} , \mathbf{b} a úhlem $\gamma \neq 60^\circ, 90^\circ$ a 120° . Existuje ještě alternativní možnost charakterizace této rovinné sítě pomocí pravoúhlé centrované buňky. Ta je charakterizována nestejnými mřížkovými vektory \mathbf{a}' , \mathbf{b}' a úhlem $\gamma' = 90^\circ$. Symetrie buňky má dvě roviny zrcadlení, které se kříží ve středovém uzlu, a pět dvojčetných os – ve středu buňky a na poloviční vzdálenosti středového a okrajových uzlů.



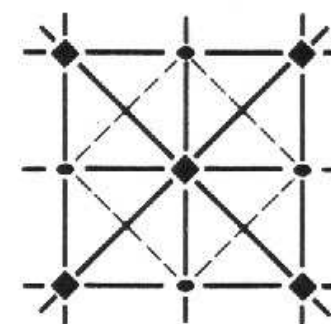
Rovinné Bravaisovy mřížky V

Tetragonální rovinná mřížka vychází z definice rovnostranného trojúhelníku, kde translační vektory $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ a úhel $\gamma = 90^\circ$. V těžišti buňky je čtyřčetná rotační osa a s ní jsou paralelní čtyři roviny zrcadlení.



Square net

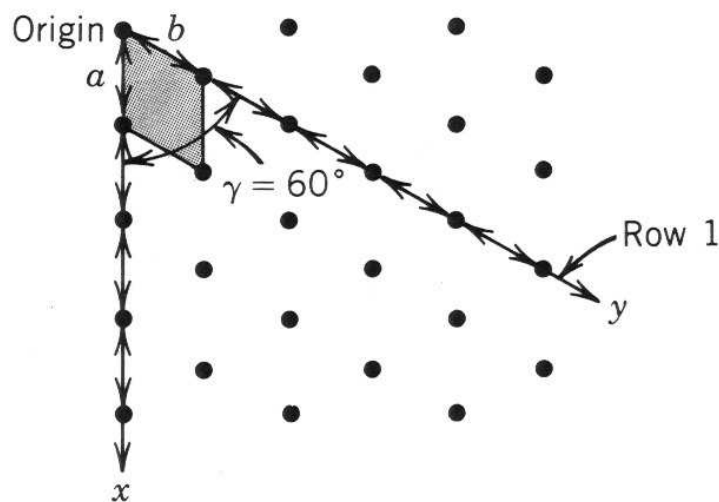
$a = b$ (or $a_1 = a_2$)
 $\gamma = 90^\circ$



p4mm

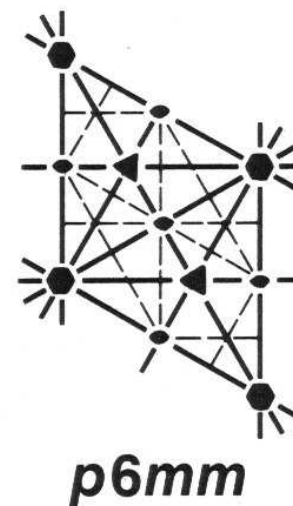
Rovinné Bravaisovy mřížky VI

Hexagonální rovinná mřížka je definována stejnými translačními vektory **a**, **b** a úhlem $\gamma = 60^\circ$. Základní buňka se jeví jako rombická (s $\gamma = 60^\circ$), ale v celkové symetrii (minimálně 4 základní buňky) najdeme šestičetnou rotační osu, 6 trojčetných rotačních os a několik rovin symetrie. V rámci jediné základní buňky je v těžišti dvojčetná osa.



Hexagonal net

$$a = b \text{ (or } a_1 = a_2)$$
$$\gamma = 60^\circ$$



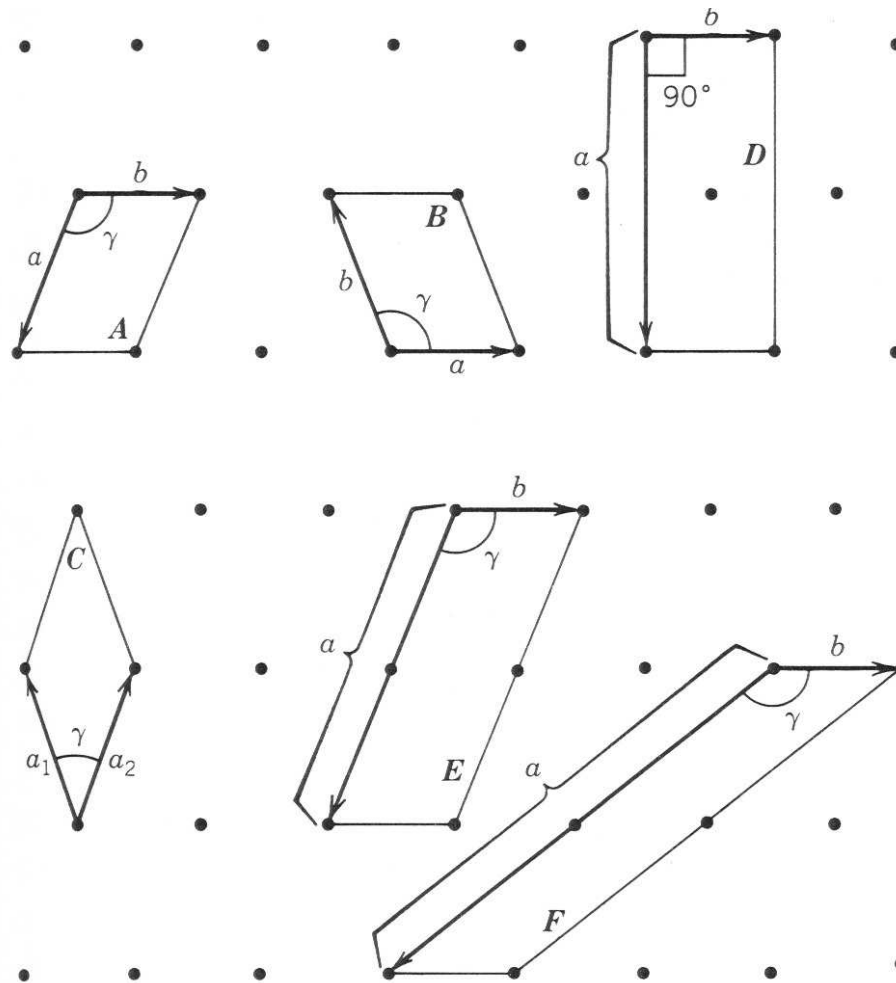
Prostorové Bravaisovy mřížky I

Prostorová mřížka vzniká posunem základního motivu rovinných mřížek v prostoru do třetího nekomplanárního směru. Lze dokázat, že existuje pouze 14 originálních možností uspořádání rovinných mřížek v prostoru a tedy 14 typů prostorových Bravaisových mřížek.

Základní buňka je jedna z možných buněk mřížky, ale vybraná tak, aby jednoznačně reprezentovala danou mřížku. Výběr základní buňky se řídí podle těchto Bravaisových pravidel:

- ✓ Počet pravých úhlů v základní buňce musí být maximální.
- ✓ Symetrie základní buňky musí být shodná se symetrií celé mřížky.
- ✓ Při dodržení předchozích podmínek musí být objem základní buňky minimální.
- ✓ V případě, kdy symetrie nemůže rozhodnout při výběru, vybírá se základní buňka tak, aby její hrany byly co nejkratší.

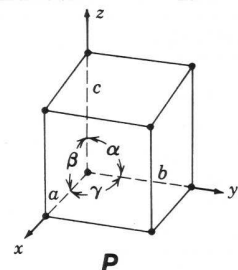
Výběr základní buňky



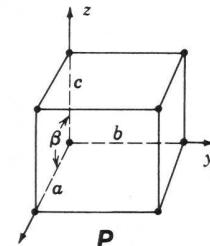
Prostorové Bravaisovy mřížky II

Základní vektory (**a**, **b**, **c**) jsou definovány hranami základní buňky a jejich délky jsou základní periody identity (a , b , c). Společně se třemi úhly (α , β , γ), které základní vektory svírají, tvoří *mřížkové parametry*.

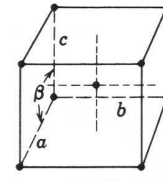
Základní buňka může být **primitivní P** (jeden mřížkový bod na buňku), nebo **centrovaná** (více mřížkových bodů na buňku). Buňky s centrovanou základnou se označují jako *bazálně centrované* a značí se A (B, C), buňky s uzlovým bodem v průsečíku tělesových úhlopříček jsou *prostorově centrované* (I), buňky s uzlovými body ve středu všech ploch jsou *plošně centrované* (F) a speciálním typem je buňka romboedrická (R). Ostatní buňky se označují jako *primitivní* (P). Názvy buněk se přejímají i pro označení mřížek. Čtrnácti typům základních buněk odpovídá čtrnáct typů Bravaisových mřížek: 7 je primitivních a 7 je centrovaných.



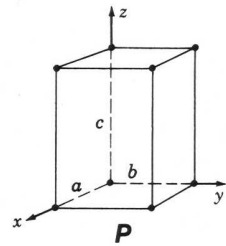
P
Triclinic
 $(\alpha \neq \beta \neq \gamma; a \neq b \neq c)$
i.e. no symmetry
imposed restrictions



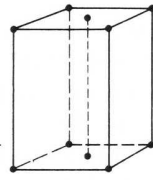
P
Monoclinic
 $\alpha = \gamma = 90^\circ (\neq \beta; a \neq b \neq c)$



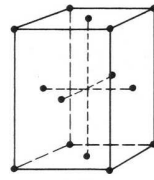
I (is equivalent to **C**
see footnote†)



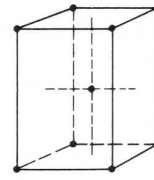
P



C

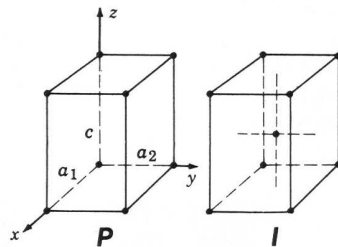


F

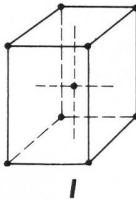


I

Orthorhombic
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ (a \neq b \neq c)$

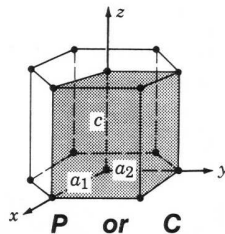


P



I

Tetragonal
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b (\neq c)$



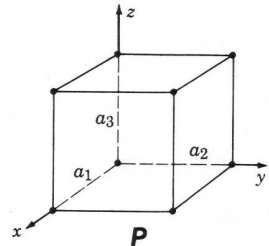
P or C

Hexagonal
 $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ;$
 $a = b (\neq c)$

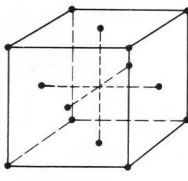


R

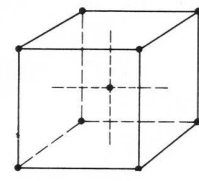
Rhombohedral
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ;$
 $a = b = c$



P



F



I

Isometric
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a = b = c$

Krystalové soustavy

Ve všech typech prostorových mřížek je třeba vybrat tři nekomplanární vektory **a**, **b**, **c** a vztáhnout je ke krystalografickým osám x , y , z . Tento výběr se zpravidla provádí tak, aby směry rotačních nebo rotoinverzních os, popř. normály rovin zrcadlení byly paralelní s vektory **a**, **b**, **c** nebo krystalografickými osami.

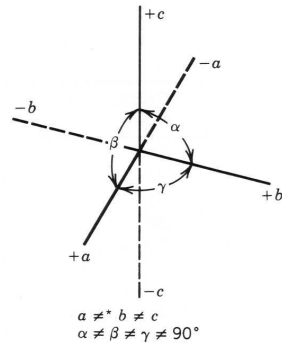
Na základě vzájemného vztahu základních vektorů, můžeme vyčlenit sedm osových systémů (krystalových soustav), které odpovídají sedmi možným primitivním prostorovým buňkám. Všechny mřížky, krystalové struktury a krystalové tvary, které mohou být definovány stejným systémem souřadných os, patří též krystalové soustavě.

Hexagonální a trigonální soustava mají sice stejný systém os, ale zpravidla se vyčleňují zvlášť. Pro hexagonální soustavu je charakteristická přítomnost šestičetných rotačních a inverzních os, pro trigonální soustavu jsou charakteristické osy trojčetné a trojčetné inverzní.

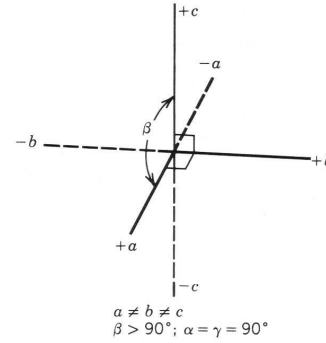
Přehled krystalových soustav

| | | | |
|----|--------------|-------------------|---|
| 1) | triklinická | $a \neq b \neq c$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ |
| 2) | monoklinická | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$ |
| 3) | rombická | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |
| 4) | tetragonální | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |
| 5) | trigonální | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ |
| 6) | hexagonální | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ |
| 7) | kubická | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |

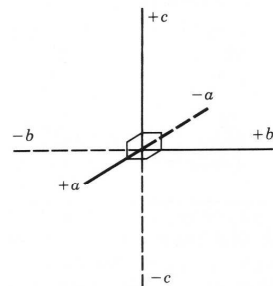
Osní kříže krystalových soustav



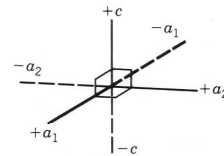
Triclinic



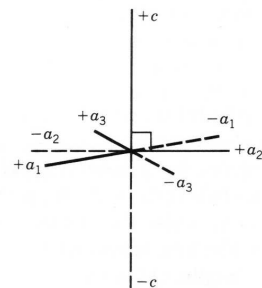
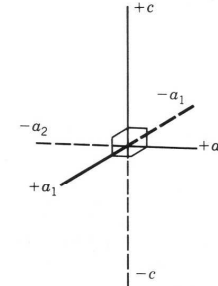
Monoclinic



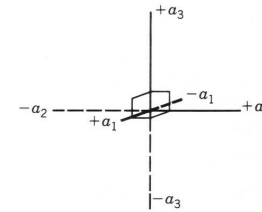
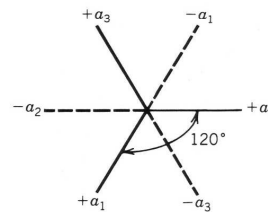
Orthorhombic



Tetragonal



Hexagonal



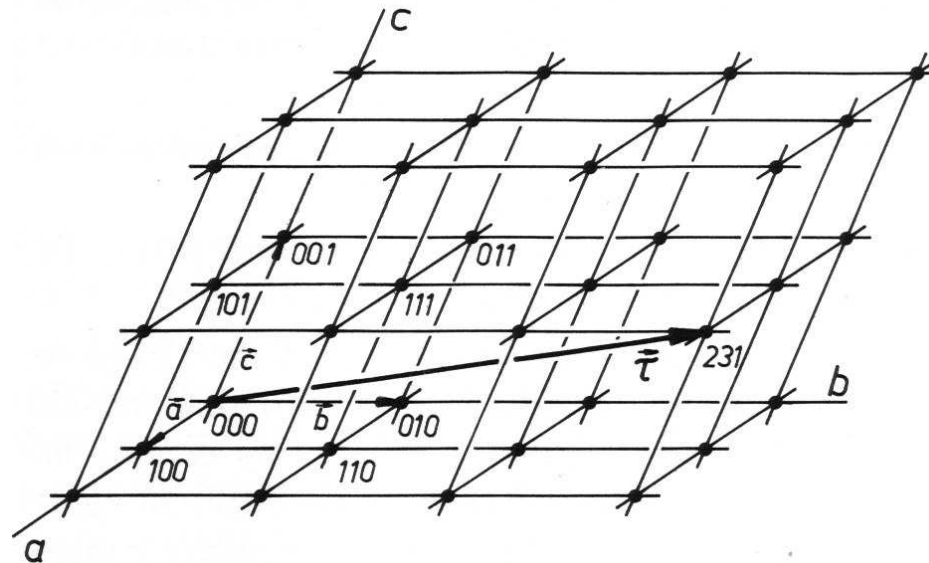
Isometric

Indexy mřížkových uzlů

Je-li některý uzel mřížky shodný s počátkem souřadného systému, potom radiusvektor libovolného uzlu mřížky může být vyjádřen vztahem:

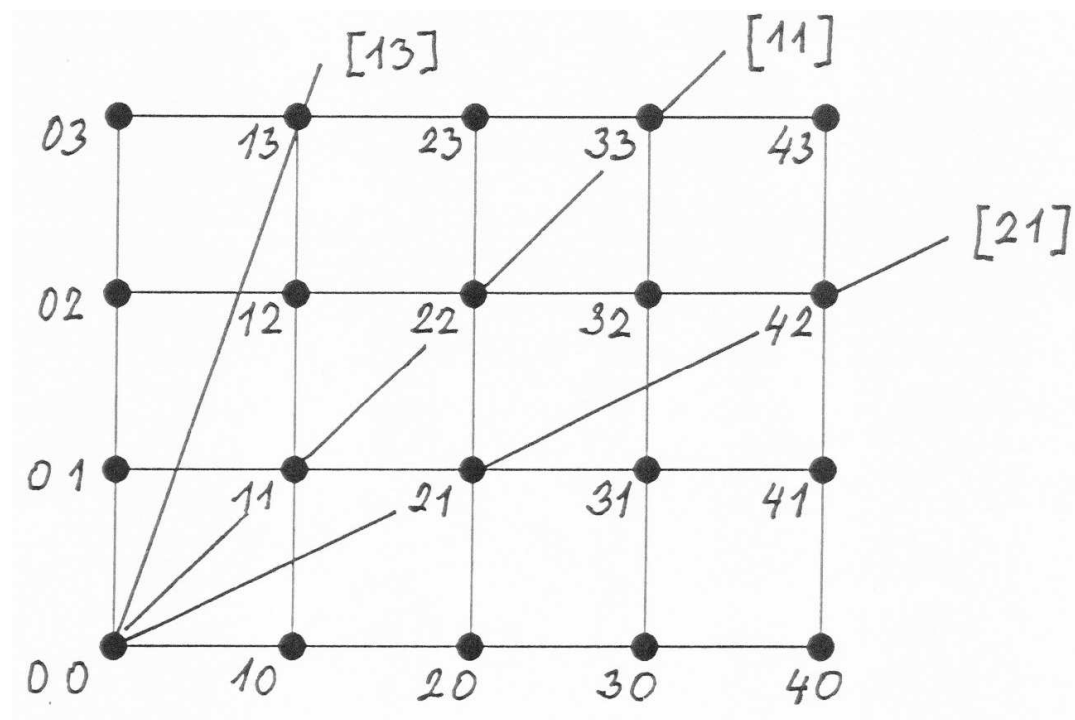
$$\mathbf{R}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c},$$

kde \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} jsou translační vektory definující elementární buňku mřížky (definují směry krystalografických os) a u , v , w jsou indexy uzlů. Nachází-li se uzlové body ve vrcholech elementárních buňek, jsou indexy u , v , w celočíselné. Skupina těchto tří indexů charakterizuje každý uzel a označuje se jako symbol uzlu - uvw .



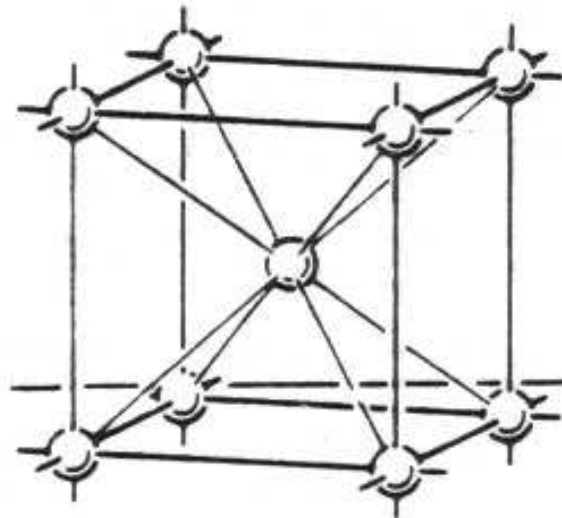
Indexy mřížkových přímek I

Přímky, definované uzlovými body, označujeme jako *uzlové přímky*. V mřížce se uzlové přímky vyskytují v nekonečných množinách, kdy každá množina je definována periodou identity podél uzlové přímky a jejím směrem (orientací vůči souřadným osám). K popisu každé množiny vybíráme vždy přímku procházející počátkem. Tato je pak jednoznačně charakterizována indexy prvního uzlu, který na ní leží. Indexy značíme [uvw].



Indexy mřížkových přímek II

Indexy uzlu $[uvw]$ nemusí být celá čísla, pak symbol přímky tvoří skupina tří nejmenších celých čísel, ve stejném vzájemném poměru jako u uzlového bodu. Toto trojčíslí označujeme jako Millerovy indexy dané přímky $[uvw]$. Např. v primitivní a tělesově centrované kubické mřížce má směr tělesové úhlopříčky symbol $[111]$, i když v tělesově centrované mřížce je prvním bodem na přímce bod $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$.

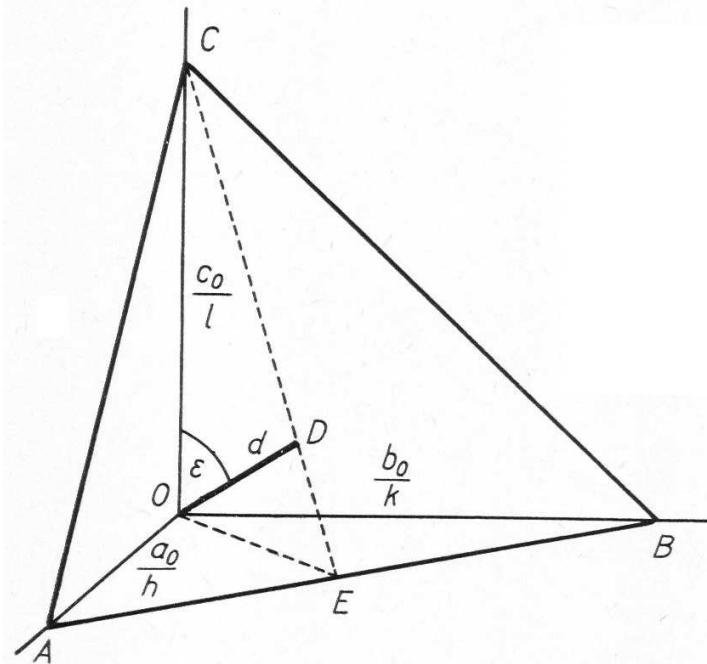


Indexy mřížkových přímek III

Millerovými indexy můžeme určit směry všech mřížkových přímek, tedy i souřadných os. Osa x má indexy $[100]$, osa y $[010]$ a osa z $[001]$. Prostorové úhlopříčky kubické buňky jsou charakterizovány symboly $[111]$, $[-111]$, $[1-11]$ a $[11-1]$. Další čtyři možné symboly odpovídají jen opačné polaritě těchto směrů, např. $[-111]$ je antiparalelní k $[1-1-1]$. Uzlové přímky ve všech těchto 8 směrech se od sebe liší pouze svojí orientací vzhledem k souřadným osám, neliší se však v hustotě obsazení uzlovými body - jedná se tedy o směry *krystalograficky ekvivalentní* s označením $\langle 111 \rangle$.

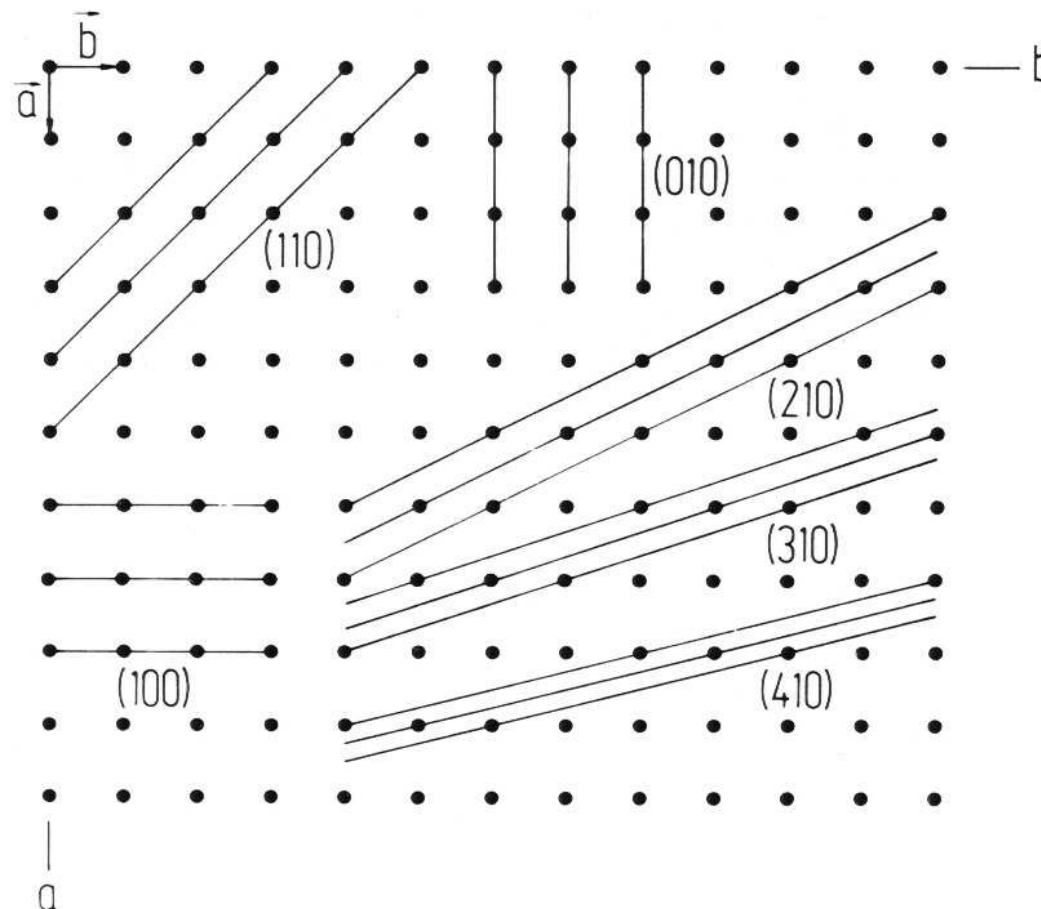
Indexování mřížkových rovin I

Podobně jako uzlových přímek, je i *uzlových rovin* v mřížce nekonečné množství. Charakteristikou každé množiny rovnoběžných uzlových rovin je orientace jedné z nich vůči souřadným osám a vzájemná mezirovinná vzdálenost. Stačí charakterizovat orientaci roviny nejbližší počátku a její vzdálenost od počátku považovat za mezirovinnou vzdálenost dané množiny. Tato rovina vytíná na osách úseky základní periody identity a/h , b/k , c/l . Celá čísla h , k , l charakterizují orientaci roviny a označují se jako Millerovy indexy roviny (hkl).



Indexování mřížkových rovin II

Indexy (hkl) množiny rovin navzájem rovnoběžných udávají, kolikrát se úseky vytnuté na souřadnicových osách první rovinou od počátku (z celé množiny ekvivalentních rovin) vejdou do periody identity odpovídajících os.



Indexování mřížkových rovin III

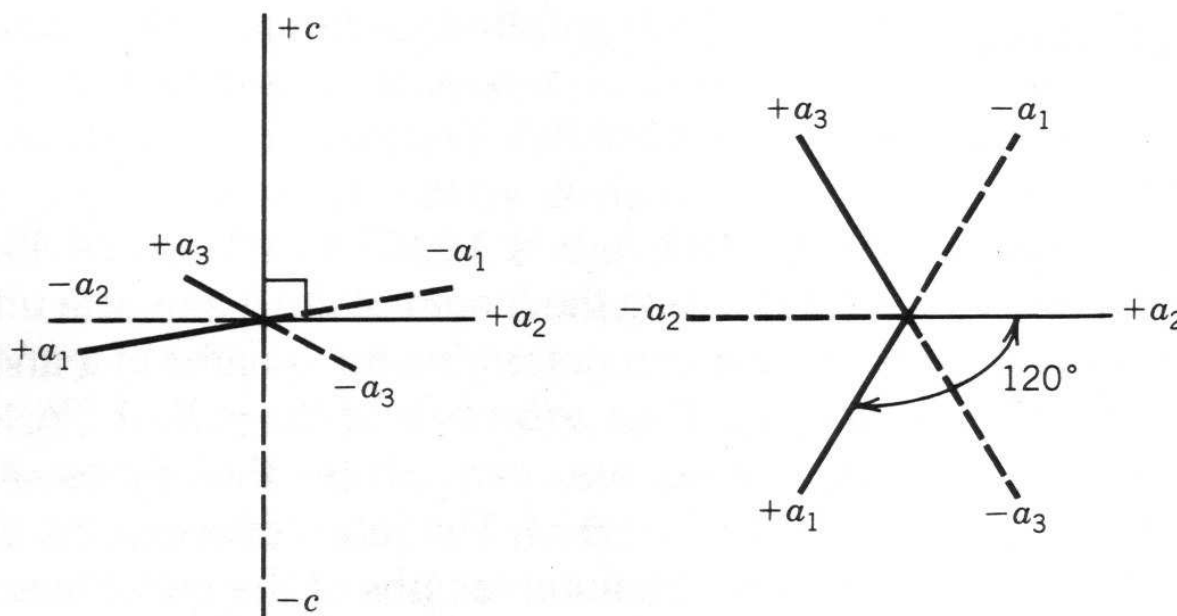
Roviny, které se liší svojí orientací, ale mají stejnou hustotu obsazení uzlovými body a stejnou mezirovinnou vzdálenost, jsou *krystalograficky ekvivalentní*. Množinu krystalograficky ekvivalentních rovin značíme $\{hkl\}$ a počet těchto rovin nazýváme četnost. Např. v elementární kubické buňce obsahuje systém $\{100\}$ tyto roviny: (100), (010), (001), (-100), (0-10) , (00-1). V rombické buňce však symbol $\{100\}$ znamená pouze roviny (100) a (-100).

Počet krystalograficky ekvivalentních rovin závisí na symetrii mřížky.

Skupina rovin, které mají společný směr, se nazývá zóna (nebo pásmo). Společný směr (osa zóny) je rovnoběžný s průsečnicemi jednotlivých rovin zóny.

Indexování v hexagonální a trigonální soustavě

U hexagonálních a trigonálních mřížek se používá čtyřindexové značení rovin, tzv. Bravaisovy indexy (hkil). Indexy h , k , i se vztahují k osám a_1 , a_2 , a_3 , které svírající úhel 120° a s osou z úhel 90° . Pro osy a_1 , a_2 , a_3 platí vektorový vztah $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 = -\mathbf{a}_3$ a tak musí platit $(h+k) = -i$ nebo $h+k+i = 0$.



Krystalová struktura

Abychom postoupili od pojmu krystalové mřížky k pojmu krystalové struktury, musí být uzlové body krystalové mřížky obsazeny stavebními částicemi jako jsou atomy, iony nebo molekuly. Seskupení částic kolem identických bodů mřížky musí být rovněž identické. Krystalová struktura je tedy složena z krystalové mřížky a báze (stavební částice uspořádané kolem identických uzlů mřížky). Důležitou charakteristikou každé struktury je číslo Z , které udává počet vzorcových jednotek látky na základní buňku.

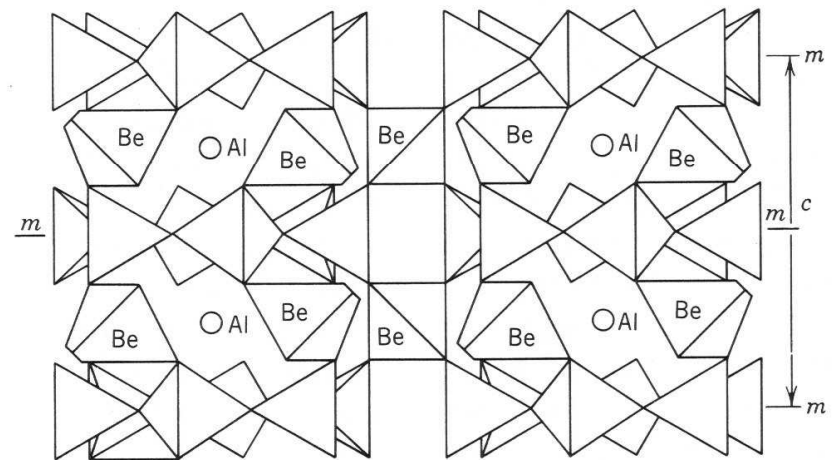
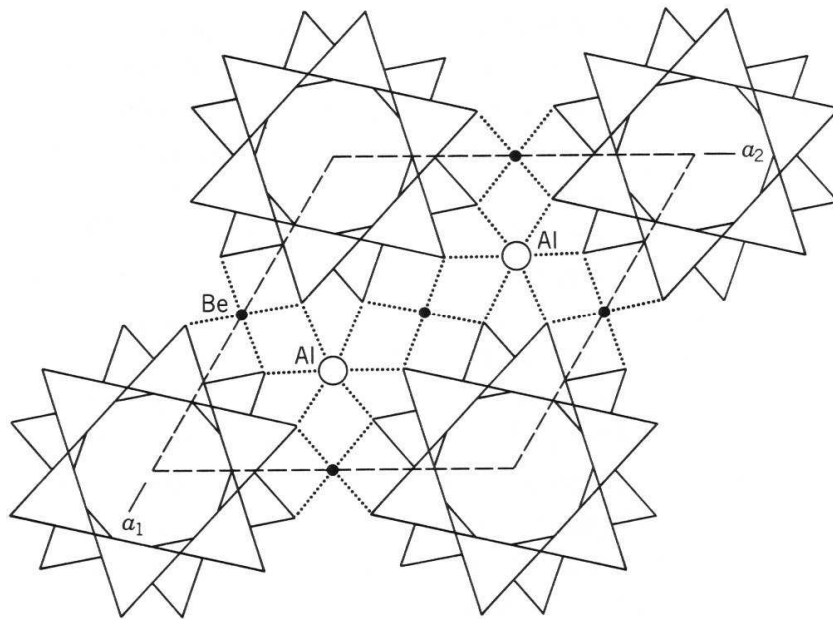
Příkladem může být minerál křemen se složením SiO_2 , jehož $Z=3$. To znamená, že v základní buňce struktury křemene najdeme tři atomy křemíku a šest atomů kyslíku.

Zobrazení krystalové struktury

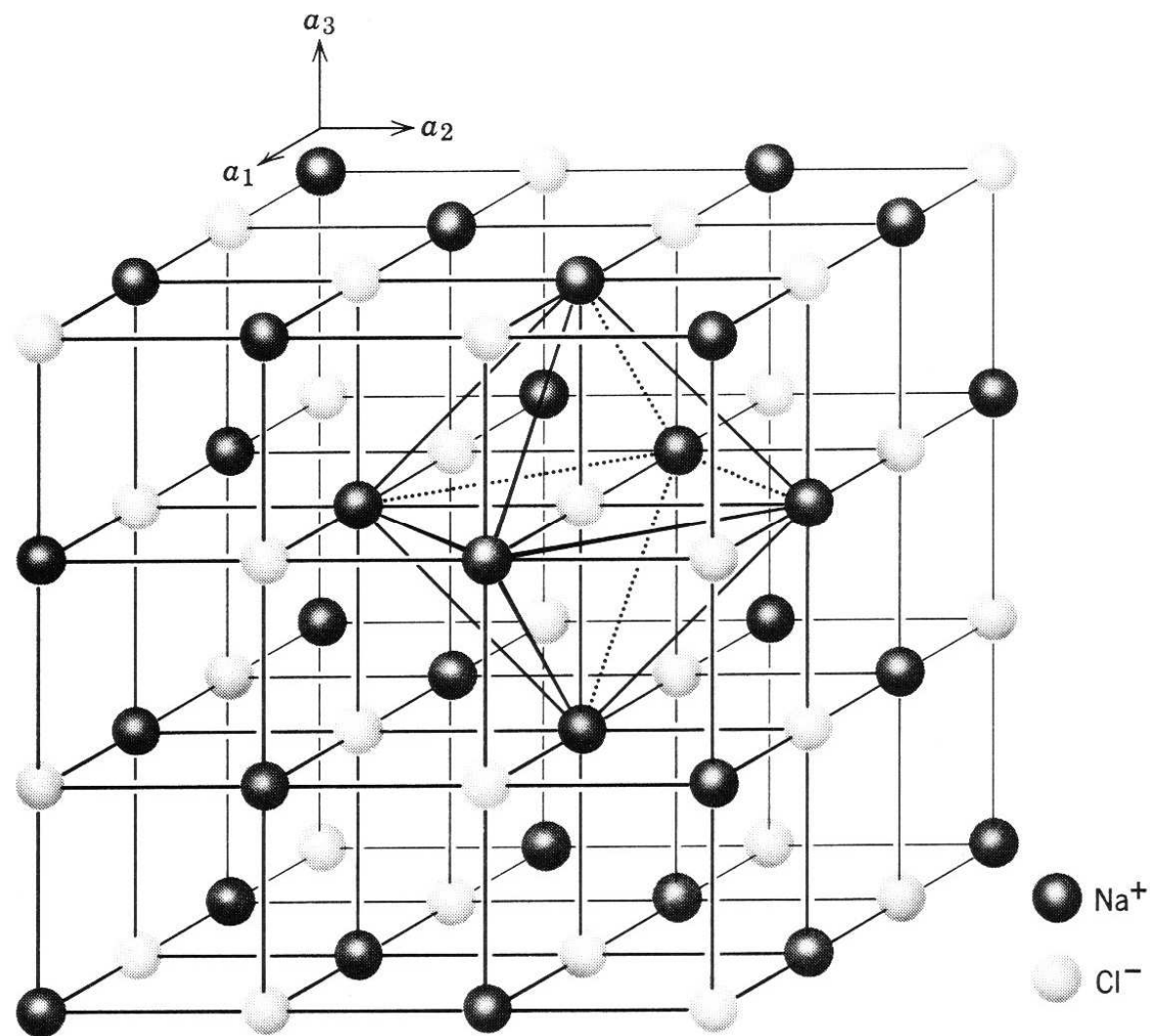
Existuje několik způsobů, jak zobrazit strukturu libovolné látky:

- pomocí frakčních mřížkových koordinát x , y , z lze zobrazit přesnou pozici vybraných atomů či celé struktury a to buď v prostorové nebo plošné perspektivě
- zobrazení atomů a jejich „vazeb“ ve zvolené rovině s udáním čísla od 0 do 100, kdy symbol 0 znamená umístění na spodové ploše základní buňky a symbol 100 je umístění na horní ploše základní buňky
- zobrazení pomocí celých iontových skupin, např. SiO_4 tetraedry
- počítačová vizualizace pomocí speciálních programů, které umožňují zobrazit jednotlivé atomy v poměrných velikostech, zobrazení vazeb, otáčení strukturou (různé řezy) apod.

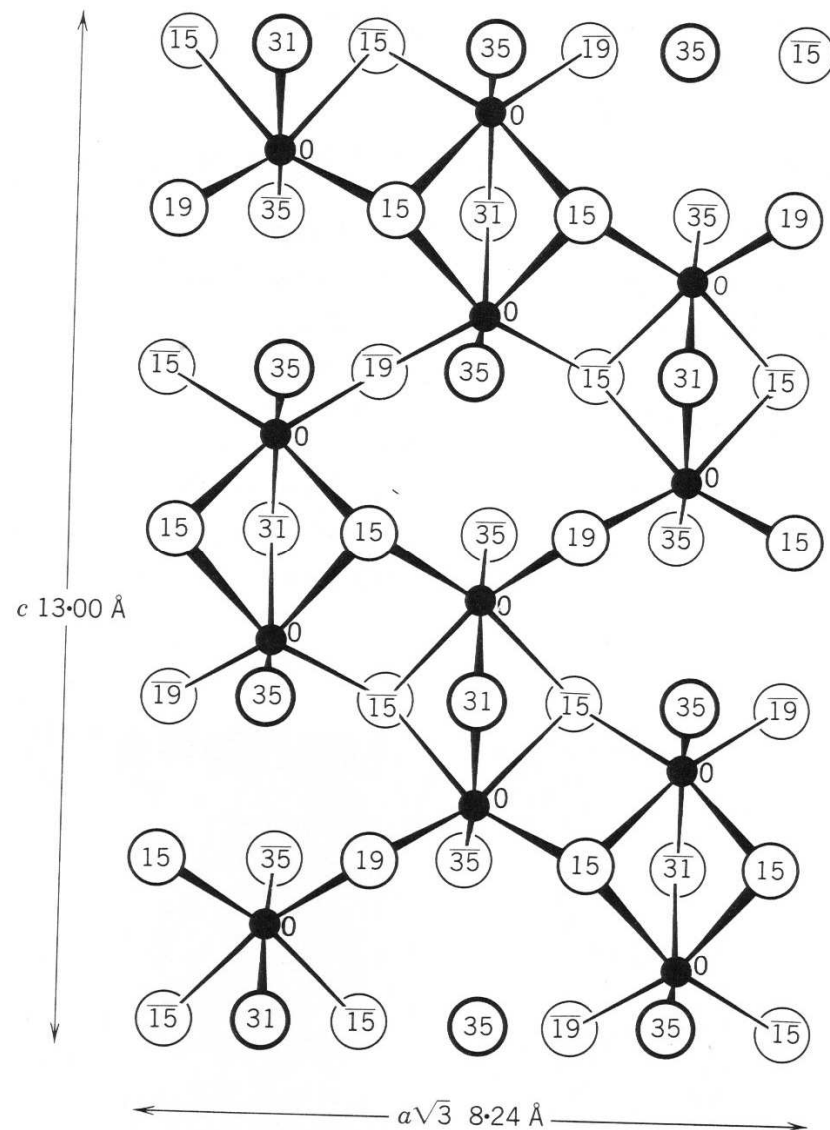
Schematické znázornění struktury berylu



Kuličkový model struktury halitu



Struktura korundu s označením atomových souřadnic



Grupy symetrie

Analýzou kombinací prvků symetrie a operací jim příslušejících, lze odvodit grupy symetrie. Podle toho, které prvky symetrie zahrneme do analýzy, lze rozlišit tři hlavní typy grup:

- bodové grupy
- rovinné grupy
- prostorové grupy

Bodové grupy

Bodová grupa je množina prvků symetrie, jejichž operace ponechávají alespoň jeden bod prostoru nepohyblivý. Tomuto požadavku vyhovuje 8 (beztranslačních) prvků symetrie: 1, 2, 3, 4, 6, -4, i, m. Tyto prvky a jejich možné kombinace tvoří 32 krystalografických bodových grup, jimiž lze charakterizovat symetrii vnějšího tvaru krystalů.

Mezinárodní (Hermann-Mauguinovy) symboly bodových grup se skládají ze symbolů prvků symetrie v tzv. význačných směrech. Symboly mohou být nejvýše trojčlenné. Znaky v symbolech jsou uvedeny v pořadí význačných směrů a vztahují se na osy souměrnosti rovnoběžné s význačným směrem a na roviny souměrnosti kolmé k význačnému směru. Je-li na některou osu kolmá rovina souměrnosti, označujeme to zlomkem např. 2/m.

Krystalograficky významné směry

| Soustava | 1. směr | 2. směr | 3. směr |
|---------------------------|--|--|---|
| triklinická | žádný směr není význačný; grupa je označena jedním symbolem, který může odpovídat libovolnému směru | | |
| monoklinická | význačným směrem je směr osy dvojčetné nebo dvojčetné inverzní, který volíme podél souřadnicové osy y nebo z | | |
| rombická | směry tří navzájem kolmých os x, y, z | | |
| Tetragonální | podél osy z | podél osy y | svírá úhel 45° s 2. směrem |
| trigonální hexagonální | podél z | podél osy y | svírá úhel 30° s 2. směrem |
| kubická | směr jedné ze tří navzájem kolmých os x, y, z | směr jedné z tělesových úhlopříček krychle | směr některé ze stěnových úhlopříček krychle |

Prostorové grupy

Prostorová grupa je množina prvků symetrie, jejichž operace jsou realizovány v trojrozměrném prostoru. Jedná se o kombinaci všech možných transformací krystalové struktury, takže prostorová grupa charakterizuje souměrnost struktury krystalu asi tak, jako bodová grupa charakterizuje souměrnost vnějšího tvaru. Jejich celkový počet 230 zahrnuje všechny kombinace translačních a beztranslačních prvků symetrie, které jsou přípustné ve 14 Bravaisových mřížkách.

Prvky souměrnosti prostorové grupy mají v prostoru základní buňky zcela určitou polohu a orientaci.

Bodovou grupu je možné odvodit z prostorové grupy odstraněním všech translací (skluzové roviny nahradit rovinami souměrnosti a šroubové osy zaměnit za osy rotace) a vzniklé makroskopické prvky převést do jednoho bodu beze změny orientace.

Značení prostorových grup

V mezinárodním značení prostorových grup se používají čtyři znaky. První je písmeno, označující typ mříže (P, A, B, C, F, I, R), a za ním následuje trojice symbolů označujících prvky symetrie, které byly kombinovány s translacemi mříže při vytváření prostorové grupy. Pořadí těchto symbolů se vztahuje k význačným směrům v dané soustavě.

Příkladem může být bodová grupa C_2 k níž náleží prostorové grupy C_2^1 , C_2^2 , C_2^3 . Zvolíme-li orientaci dvojčetné osy ve směru hrany b , má úplný symbol grupy C_2^1 tvar P121; jestliže bude osa 2 orientována podél hrany c , potom $C_2^1 = P112$. Analogicky k tomu bude C_2^2 buď P12₁1 nebo P112₁ a C_2^3 buď C121 (centrování ve dvojici stěn ab) nebo B112 (centrování ve dvojici stěn ac).

Reciproká mřížka

Reciproká mřížka se zavádí jako abstraktní konstrukce prostorové mřížky pro zjednodušení interpretace některých difrakčních experimentů. Její konstrukce je následující: ze zvoleného počátku vedeme normály ke každé osnově rovin (hkl) a na každou z nich nanese vzdálenost $1/d_{hkl}$. Získané body vytvoří reciprokou mřížku, jejíž uzly odpovídají rovinám přímé mřížky. Každý bod reciproké mříže reprezentuje vlastnosti osnov rovin, tj. orientaci a mezirovinnou vzdálenost. Veličiny reciproké mřížky označujeme hvězdičkou: vektory základní buňky \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* ; mřížkové parametry a^* , b^* , c^* , α^* , β^* , γ^* .

Pro parametry reciproké mřížky platí jednoduché vztahy:

$$a^* = 1 / d_{100} \qquad b^* = 1 / d_{010} \qquad c^* = 1 / d_{001}$$

Konstrukce reciproké mřížky - graficky

